シッフ

新版
量子力学(下)

井上　健　訳

物理学叢書
9

吉岡書店

新　版

量子力学

(下)

シ　ッ　フ著
井上　健訳

物理学叢書
9

吉岡書店

QUANTUM MECHANICS

THIRD EDITION

LEONARD I. SCHIFF
Professor of Physics
Stanford University

McGRAW-HILL BOOK COMPANY
New York
St. Louis
San Francisco
Toronto
London
Sydney

目　　次

（下　巻）

第IX章　衝突の理論における近似法

第XI章 輻射の半古典論的取扱い

第XII章 原子・分子・原子核

第Ⅸ章　衝突の理論における近似法

第Ⅷ章の始めに注意しておいたように，物理的に興味のある系で，それに対して厳密な解を求めることのできるものは極めて少ないため，理論の応用に当っては近似法が重要な役割を演じることになる．この章では散乱問題によく用いられるいろいろな方法を考察する．話を散乱行列の議論から始めることにするが，これはあらゆる種類の衝突問題がそれを使って議論しうるという意味で，第Ⅴ章での理論に比べてより一般的な枠組を提供するものなのである．散乱行列それ自身は，近似法というものではないとしても，それは摂動近似やその他の近似のための一つの出発点として都合のよいものになっており，この種の近似のいくつかについてはこの章の後半で議論することにする．

36□散　乱　行　列

第Ⅴ章で議論された衝突理論では，散乱を起こしているポテンシャルエネルギーは時間を含まないこと，したがってエネルギー固有関数を利用することが可能であることが仮定されていた．方程式（18.10）は入射流束が無限大の断面積をもつ一つの平面波によって表わされているような情況を記述している．第21図に関連して指摘しておいたように，入射ビームは常に集束されたものである以上この情況は現実的ではない．しかしながら，僅かに異なった方向に進行する無限平面波を重ね合せることによって，集束を考慮に入れることができる；このときの成分平面波の方向についての角度の拡がりをラジアンで測ったものは，粒子の波長と集束用の絞りの直径との比のオーダーになる．この角度は実際の場合には極めて小さいもので，散乱振幅の計算には影響がないのである．第21図によって表わされている情況を記述するもう一つのやり方は，伝播ベクトル $\mathbf{k}$ はエネルギーを使って $E=\hbar^2k^2/2\mu$ で与えられるきまった大きさ k をもつが，その横方向の成分 k_x および k_y は k に比べて極めて小さいとすることである；つまりこの場合 k_z は実際上は k に等しくなっており，“波束”としてはその進行方向に直角な二つの方向

についてだけで十分よく定義されているわけである．そうするとある単一のエネルギーEだけが現われることになるため，時間を含まない Schrödinger 方程式を用いることができることになる．

さらには，一定の入射流束と定常的な外向きの散乱波という時間に無関係なモデル自体が，ある種の事情のもとでは適当ではなくなるということも起こり得るであろう．問題の本来の性質からいって，あるいはある時刻に“かけられ”た後ある時刻に“はずされる”ものとしてVを考えておくのが便利なことがありうるといった理由からして，散乱を起こしているポテンシャルエネルギーが時間に関係してくる場合には，このようなモデルが正しいものであり得ないことは確かである．たとえVが時間について一定である場合でも，3個の空間方向のすべてについてかなりよく定義されており，しかも散乱ポテンシャルを通過する際にある外向きの球面状のパルスを発生しているような運動中の一つの波束でもって，入射平面波を置き換える方が望ましいということも考えられうることである．この種の波束は，§12 および 17 の終りで一次元の場合について論じておいたのと同じような工合に，時間を含む平面波を重ね合すことによって構成しうるものである．そしてその場合には方程式 (12.18) から結論されるように，Rをこの波束の大きさとすれば，$\mathbf{k}$の三成分のそれぞれについての拡がりは $1/R$ のオーダーになる．これに対応するエネルギーについての拡がりは E/kR のオーダーである；これは実際の場合にはEに比べれば極めて小さいとはいうものの，この場合にはあくまで時間を含んだ Schrödinger 方程式が用いられねばならないのである．[1]

まず波動関数およびそれに密接に関連した Green の関数に対する積分方程式を導くことから出発して，その後で散乱行列を定義することにする．この行列によって記述されるのは，空間的に系の相互作用をしている部分間の距離が極めて大きくて相互作用が無視しうるか，あるいは時間的に相互作用が未だ生じていないか，あるいはもはや相互作用が起こることがない時刻を考えている，という意味での系の漸近的な振舞いなのである．つまり，散乱行列は散乱過程についての観測可能の側面を記述するものである．このような記述は系の波動関数を相互作用の起こっている空間-時間領域を通じて

---

1)　この波束を用いた取り扱いのさらに立ち入った説明については次のものを見よ：M. L. Goldberger and K. M. Watson, "Collision Theory" (Wiley, New York, 1964) の第3章；R. J. Newton, "Scattering Theory of Waves and Particles" (McGraw-Hill, New York, 1966) の第6章.

積分してゆくことによって得られるものである以上，散乱に関与している相互作用中に潜んでいる情報はどんなものでもすべてこの種の記述に含まれている．同時にまた，ハミルトニアンが物理的に意味があるものになっている，あるいはある種の対称性をもっているという事実によって，可能な散乱諸過程にどのような制限が課せられるかということもそれから明らかになる．Schrödinger 方程式から導かれた場合の散乱行列は，ハミルトニアン以上の情報を含むものではないことは明らかである．しかしながら，原子核物理学における場合のようにハミルトニアン中に現われる相互作用がはっきり知られていない場合にも，やはり散乱行列は有用な結果を与えうるものなのである．

36-1 Green 関数と伝播関数

たとえ運動している波束を具体的に使って議論を進めることにはならないにしても，情況が時間に関係している場合に固有な一般的側面をできるだけ長く保ったままで議論を進めてゆくことが望ましい．したがって，議論の出発点としては，換算質量μをもつ2個の粒子の相対運動を記述している次の完全な Schrödinger 方程式をとることにする．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)=H\psi(\mathbf{r},t)=[H_0+V(\mathbf{r},t)]\psi(\mathbf{r},t),\qquad H_0=-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2 \tag{36.1}$$

方程式（36.1）はψの時間についての一次の導関数をψ自身を使って与えるものになっており，時間についての高階の導関数がこの方程式中にはあらわれていないから，すべての$\mathbf{r}$およびある特定のtに対するψの値は，すべての$\mathbf{r}$および（以前および以後の両方の）すべてのtに対するψを決定するのに十分である．さらに，この波動方程式はψについて線型であるから，その解は重ね合すことができるし，異なった時刻におけるψの間の関係は線型になっているはずである．このことはψが次のような形の斉次積分方程式を満たさなければならないことを意味する．

$$\psi(\mathbf{r}',t')=i\int G(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r \tag{36.2}$$

ただし積分は全空間にわたるものである．この方程式はまたGを定義することにもなっている．このGはハミルトニアンHに対応する **Green 関数** *Green's function* とよばれている．

方程式（36.2）は，ψの時間について前向きの伝播（$t'>t$）と後向きの伝播（$t'<t$）

とを区別していない．しかしこれらの二つの場合をはっきり区別しておくのが都合がよい場合が少なくない．そこで，前向きの伝播に対して，**遅延 Green 関数** *retarded Green's function* または**伝播関数** *propagator* を次式によって定義する．

$$\begin{aligned} G^{+}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)&=G(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t) \qquad t'>t \\ &=0 \qquad\qquad\qquad\quad t'<t \end{aligned} \tag{36.3}$$

さらに次式によって定義される単位階段関数 $\theta(\tau)$ を導入する．

$$\theta(\tau)=1 \qquad (\tau>0), \qquad \theta(\tau)=0 \qquad (\tau<0) \tag{36.4}$$

そうすれば

$$\theta(t'-t)\psi(\mathbf{r}',t)=i\int G^{+}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r \tag{36.5}$$

という方程式は，$t'<t$ に対しては $0=0$ という自明の恒等式になり，$t'>t$ に対しては (36.2) と同一になる．

同様に時間について後向きの伝播に対しては次のような**先進 Green 関数** *advanced Green's function* を定義することができる．

$$\begin{aligned} G^{-}(\mathbf{r}',t;\mathbf{r},t)&=-G(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t) \qquad t'<t \\ &=0 \qquad\qquad\qquad\qquad t'>t \end{aligned} \tag{36.6}$$

この場合もやはり

$$\theta(t-t')\psi(\mathbf{r}',t')=-i\int G^{-}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r \tag{36.7}$$

という方程式は，$t'>t$ に対しては一つの恒等式になり $t'<t$ に対しては (36.2) と同一になる．要するに，(36.5) と (36.7) とを一諸にすれば (36.2) と同等になるわけである．

任意の時刻においては ψ を任意に選ぶことができるという事実（問題1を見よ）を利用すれば，(36.5) と (36.7) から $G^{\pm}$ を含む次の4個の積分方程式が得られる：

$$G^{+}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)=i\int G^{+}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r}_1,t_1)G^{+}(\mathbf{r}_1,t_1;\mathbf{r},t)d^3r_1 \qquad \text{ただし } t'>t_1>t$$

$$G^{-}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)=-i\int G^{-}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r}_1,t_1)G^{-}(\mathbf{r}_1,t_1;\mathbf{r},t)d^3r_1 \qquad \text{ただし } t'<t_1<t$$

$$\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\int G^{+}(\mathbf{r}',t;\mathbf{r}_1,t_1)G^{-}(\mathbf{r}_1,t_1;\mathbf{r},t)d^3r_1 \qquad \text{ただし } t>t_1$$

$$\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')=\int G^-(\mathbf{r}',t\,;\,r_1,t_1)G^+(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)d^3r_1 \qquad \text{ただし } t<t_1 \tag{36.8}$$

36-2　自由粒子の Green 関数

$V=0$ の場合に対しては（36.2）で定義されている Green 関数に対する一つの具体的な表式を容易に求めることができる．それを G_0 と書くことにする；この G_0 は自由粒子の場合についての方程式（10.19）の括弧中の項に比例するもので，第Ⅲ章の問題8の解法と類似のやり方でその値を求めればよい．その結果は次のものになる．

$$G_0(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)=-i\left[\frac{\mu}{2\pi i\hbar(t'-t)}\right]^{\frac{3}{2}}\exp\frac{i\mu|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^2}{2\hbar(t'-t)} \tag{36.9}$$

G_0 に対応する遅延 Green 関数すなわち自由粒子伝搬関数は（36.3）から求められる．

$$G_0^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)=\theta(t'-t)G_0(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t) \tag{36.10}$$

同様に，先進 Green 関数は（36.6）から求められる．

$$G_0^-(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)=-\theta(t-t')G_0(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t) \tag{36.11}$$

（36.10），（36.11）を使えば，（36.8）が自由粒子の場合に成り立っていることは直接代入してみて確かめることができる．

なお，G_0^+ と G_0^- との間には，次の複素共役関係があることが，（36.9）から（36.11）までの関係を用いて示される．

$$G_0^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)=G_0^{-*}(\mathbf{r},t\,;\,\mathbf{r}',t') \tag{36.12}$$

後で証明されているように，この関係はVが実の量であるならば一般の $G^\pm$ に対してもやはり成り立つのである．

36-3　ψ に対する積分方程式

ψ に対する（36.5）の積分方程式の反復形式（iterated form）を求めよう．[1] t と t' の間のいくつかの極めて短い時間々隔を除けば V の作用は切られているものと考えてみる；Vが作用している時間間隔を t_1 から $t_1+\Delta t_1$ まで，t_2 から $t_2+\Delta t_2$ まで，……最後に t_n から $t_n+\Delta t_n$ まで，とする．ただし $t'>t_n>\cdots>t_1>t$. そうすれば，$t_i+\Delta t_i$ から t_{i+1} までの時間間隔のそれぞれに対しては G_0^+ が伝搬関数の役目をしているとし

1) R. P. Feynman, *Phys. Rev.* **76**, 749 (1949); J. D. Bjorken and S. D. Drell, "Relativistic Quantum Mechanics" (McGraw-Hill, New York, 1964) の §§6.2, 6.3.

てよい：すなわち

$$\theta(t_{i+1}-t_i-\Delta t_i)\psi(\mathbf{r}_{i+1},t_{i+1})$$
$$=i\int G_0^+(\mathbf{r}_{i+1},t_{i+1}\,;\,\mathbf{r}_i,t_i+\Delta t_i)\psi(\mathbf{r}_i,t_i+\Delta t_i)d^3r_i \qquad (36.13)$$

t_i から $t_i+\Delta t_i$ までの伝搬には，H_0 とVの両方が関係してくる．Δt_i は後で無限小とみなされることになるのであるから，ψ におけるこの２種の変化は相加的に効くものとしてよい．H_0 による変化の部分は G_0^+ に関係しており，(36.13) の形のもので勘定されるとしてよい．ψ における変化の中でVに関係する部分は，(36.1) から容易に求められて $-(i/\hbar)V(\mathbf{r}_i,t_i)\psi(\mathbf{r}_i,t_i)\Delta t_i$ となる；この変化に引き続いて，(36.13) に従って $t_i+\Delta t_i$ から t_{i+1} への自由粒子伝搬がおこるはずであるが，Δt_i について一次の量だけを問題にする以上 G_0^+ の引数中の Δt_i は省略することができ，結局次の方積式が得られることになる．

$$\theta(t_{i+1}-t_i)\psi(\mathbf{r}_{i+1},t_{i+1})$$
$$=i\int G_0^+(\mathbf{r}_{i+1},t_{i+1}\,;\,\mathbf{r}_i,t_i)\left[1-\frac{i}{\hbar}V(\mathbf{r}_i,t_i)\Delta t_i\right]\psi(\mathbf{r}_i,t_i)d^3r_i \qquad (36.14)$$

したがってこれらを合成した t から t' への伝搬は次式のようになる．

$$\theta(t'-t)\psi(\mathbf{r}',t)=\int\cdots\int iG_0^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_n,t_n)\left[1-\frac{i}{\hbar}V(\mathbf{r}_n,t_n)\Delta t_n\right]$$
$$\times iG_0^+(\mathbf{r}_n,t_n\,;\,\mathbf{r}_{n-1},t_{n-1})\cdots iG_0^+(\mathbf{r}_2,t_2\,;\,\mathbf{r}_1,t_1)\left[1-\frac{i}{\hbar}V(\mathbf{r}_1,t_1)\Delta t_1\right]$$
$$\times iG_0^+(\mathbf{r}_1,t_1\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r_n\cdots d^3r_1d^3r$$

この表式の右辺の掛算を実行して括弧をはづしてしまった上で (36.8) の第一式を利用して簡単化した結果は次のようになる．

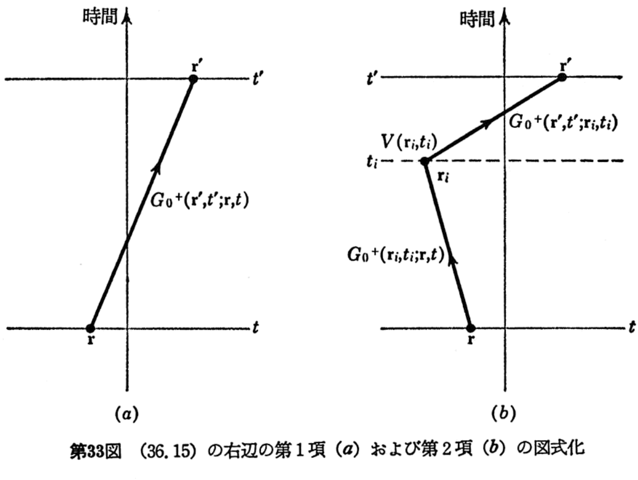
$$\theta(t'-t)\psi(\mathbf{r}',t')=i\int G_0^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r$$
$$+\frac{i}{\hbar}\sum_i\iint G_0^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_i,t_i)$$
$$\times V(\mathbf{r}_i,t_i)\Delta t_iG_0^+(\mathbf{r}_i,t_i\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r_id^3r$$
$$+\frac{i}{\hbar^2}\sum_{ij}\iiint G_0^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_i,t_i)V(\mathbf{r}_i,t_i)\Delta t_iG_0^+(\mathbf{r}_i,t_i\,;\,\mathbf{r}_j,t_j)$$
$$\times V(\mathbf{r}_j,t_j)\Delta t_jG_0^+(\mathbf{r}_j,t_j\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r_id^3r_jd^3r+\cdots$$

ただし，第三項では $t_i>t_j$ で，以下同様な項がつづく．ここでVが効いている時間間

隔 Δt_i の回数をふやし，その持続時間を短かくしていって遂にはVが連続的に効いている場合になったとすれば，次のように和を積分で置き換えてよいことになる：

$$
\begin{aligned}
\theta(t'-t)\psi(\mathbf{r}',t') &= i\int G_0^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r \\
&+\frac{i}{\hbar}\int dt_i\iint G_0^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_i,t_i) \\
&\qquad\times V(\mathbf{r}_i,t_i)G_0^+(\mathbf{r}_i,t_i\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r_i d^3r \\
&+\frac{i}{\hbar^2}\int dt_i\int dt_j\iiint G_0^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r}_i,t_i)V(\mathbf{r}_i,t_i)G_0^+(\mathbf{r}_i,t_i\,;\,\mathbf{r}_j,t_j) \\
&\qquad\times V(\mathbf{r}_j,t_j)G_0^+(\mathbf{r}_j,t_j\,;\,\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r_i d_3r_j d^3r+\cdots
\end{aligned}
\tag{36.15}
$$

(36.15) で時間についての積分はすべて t から t' までとるとしてよいことに注意されたい；つまり，たとえば第３項で $t_i>t_j$ であることを要求する必要はない．というのは，もしも $t_i>t_j$ でなければ $G_0^+(\mathbf{r}_i,t_i\,;\,\mathbf{r}_j,t_j)$ は零になるからである．



第33図 (36.15) の右辺の第１項 (*a*) および第２項 (*b*) の図式化

(36.15) を，一つの摂動級数として解釈することは自然なことである．その最初の２項を図式化して示しているのが第33図である．つまり，右辺の第１項は t から t' への自由伝搬に対応する振幅を表わしており（図 33a），第２項は t から t_i へと t_i から t' への自由伝搬を伴う t_i での１回の相互作用のすべての和に対応している等である，

(36.15) を次のように書き直しておくのが便利である.

$$\theta(t'-t)\psi(\mathbf{r}',t')=i\int G_0^+(\mathbf{r}',t';r,t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r$$
$$+\frac{1}{\hbar}\int dt_i\int G_0^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r}_i,t_i)V(r_i,t_i)\Big[i\int G_0^+(\mathbf{r}_i,t_i;\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r$$
$$+\frac{i}{\hbar}\int dt_j\int\int G_0^+(\mathbf{r}_i,t_i;\mathbf{r}_j,t_j)$$
$$\times V(\mathbf{r}_j,t_j)G_0^+(\mathbf{r}_j,t_j;\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r_jd^3r+\cdots\Big]d^3r_i$$

もしも括弧内の級数が収斂するものと仮定するならば，(36.15) によってその場合の括弧内の量は $\theta(t_i-t)\psi(\mathbf{r}_i,t_i)$ に等しく，$t_i>t$ であるからこれはまた $\psi(\mathbf{r}_i,t_i)$ に他ならない．こうして，(36.5) とは異なって G^+ ではなくて G_0^+ だけを含む ψ に対する一つの積分方程式が得られることになる：

$$\theta(t'-t)\psi(\mathbf{r}',t')=i\int G_0^+(\mathbf{r}',t';r,t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r$$
$$+\frac{1}{\hbar}\int dt_i\int G_0^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r}_i,t_i)V(\mathbf{r}_i,t_i)\psi(\mathbf{r}_i,t_i)d^3r_i \qquad (36.16)$$

t_i に関する積分は t から t' までである.

36-4 伝播関数に対する積分方程式

(36.5) と (36.15) とを比較すれば，次の関係が示される.

$$G^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)=G_0^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)$$
$$+\frac{1}{\hbar}\int\int G_0^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r}_i,t_i)V(\mathbf{r}_i,t_i)G_0^+(\mathbf{r}_i,t_i;\mathbf{r},t)dt_id^3r_i$$
$$+\frac{1}{\hbar^2}\int\int\int\int G_0^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r}_i,t_i)V(\mathbf{r}_i,t_i)G_0^+(\mathbf{r}_i,t_i;\mathbf{r}_j,t_j)$$
$$V(\mathbf{r}_j,t_j)G_0^+(\mathbf{r}_j,t_j;\mathbf{r},t)dt_id^3r_idt_jd^3r_j+\cdots \qquad (36.17)$$

この場合にもやはり右辺の級数が収斂するものと仮定しておけば，この関係を次の方程式の形にまとめて書くことができる.

$$G^+(\mathbf{r}'t';\mathbf{r},t)=G_0^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)$$
$$+\frac{1}{\hbar}\int\int G_0^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r}_i,t_i)V(\mathbf{r}_i,t_i)G^+(\mathbf{r}_i,t_i;\mathbf{r},t)dt_id^3r_i \qquad (36.18)$$

36-5 先進 Green 関数を用いた書き直し

36.3, 36.4 の諸結果は，遅延 Green 関数ではなくて先進 Green 関数を使って書き直すことができる．この種の結果は上で求められた伝播関数の方程式ほどには便利なものではないにしても，一応形式を完全にするためにここで与えておくことにする．

今度の場合には $t'<t$ になるから，したがって話の出発点としては，$t'<t_n<\cdots<t_1<t$ として $t_n-\Delta t_n$ から t_n まで，$t_{n-1}-\Delta t_{n-1}$ から t_{n-1} まで，……最後に $t_1-\Delta t_1$ から t_1 までの各時間々隔以外ではVは効いていないものとする．そうすれば，前向きの伝播に対する（36.14）の基礎方程式は，時間について後向きの伝播に対する次のような方程式で置き換えられる：

$$\theta(t_i-t_{i+1})\psi(\mathbf{r}_{i+1},t_{i+1})$$
$$=-i\int G_0^-(\mathbf{r}_{i+1},t_{i+1};\mathbf{r}_i,t_i)\left[1+\frac{i}{\hbar}V(\mathbf{r}_i,t_i)_i\Delta t_i\right]\psi(\mathbf{r}_i,t_i)d^3r_i \tag{36.19}$$

（36.14）と比べてみるとわかるように，（36.19）の右辺の一番前のマイナス符号は（36.6）または（36.7）でのマイナス符号からきているもので，括弧内にプラス符号があらわれているのは，ψ についての変化が t_i から $t_i+\Delta t_i$ まででではなく t_i から $t_i-\Delta t_i$ までの間で計算されているためである．

ここで明らかなように，（36.15）と（36.16）の方程式は次のような置き換えをすることによって正しい結果に書き直すことができることになる：

$$\theta(t'-t)\to\theta(t-t')\qquad G_0^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\to G_0^-(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\qquad i\to -i \tag{36.20}$$

同じような工合に，（36.17）と（36.18）の方程式も次のような置き換えをすることによって正しい結果に書き直されるものとすることができる．

$$\begin{aligned}&G_0^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\to G_0^-(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\\&G^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\to G^-(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\end{aligned} \tag{36.21}$$

書き直された方程式のすべてについて，時間についての積分はすべて t' から t までになる．

G_0^+ を用いて G^+ をあらわしている（36.17）の方程式と，それに対応する G_0^- を用いて G^- を表わすように書き直された方程式を用い，さらに（36.12）の関係を考慮することにすれば，Vが実の量である限り次の関係が成立することを証明することが

できる．

$$G^{+}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)=G^{-*}(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') \tag{36.22}$$

36-6 Green 関数に対する微分方程式

これまでのところでは，ψ に対する微分方程式（36.1）を利用して，ψ に対する積分方程式（36.2），（36.15），（36.16）およびそれに対応する $G^{\pm}$ に対する積分方程式（36.17），（36.18）をつくってきた．Green 関数はまた（36.1）に類似の微分方程式を満たす；$G^{\pm}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)$ は要するに $\mathbf{r},t$ における瞬間的な点源によってつくり出された $\mathbf{r}',t'$ における波動関数である以上，この方程式は非斉次方程式になることが予想される．

G^{+} に対するこの方程式は，（36.5）に $i(\partial/\partial t')-(1/\hbar)H'$ を作用させてやれば求めることができる．ただし，H' はダッシュのついた変数 $\mathbf{r}',t'$ を用いて表わされた H である．（36.4）から導かれる関係

$$\frac{d}{d\tau}\theta(\tau)=\delta(\tau) \tag{36.23}$$

を利用することも必要になる．その結果は，（36.1）を使って次のようになる．

$$i\delta(t'-t)\psi(\mathbf{r}',t')=i\int\left(i\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{1}{\hbar}H'\right)G^{+}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)d^3r$$

この方程式からわかることは，右辺が $\delta(t'-t)$ に比例していなければならないこと，したがって $\psi(\mathbf{r},t')$ だけが右辺の被積分項中にあらわれることができる，ということである．しかし，$\psi(\mathbf{r},t')$ は任意の特定の時刻 t' における $\mathbf{r}$ の任意関数でありうるから，右辺の被積分項中の残りの部分は $\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ に比例していなければならない．要するに結論としては

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{1}{\hbar}H'\right)G^{+}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)=\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\,\delta(t'-t) \tag{36.24}$$

となる．

すぐ前のパラグラフで（36.7）を使って議論を始めていたならば，G^{-} もやはり（36.24）の方程式を満たしていることになったろうということは容易にわかることである．つまり，G^{+} と G^{-} は同一の非斉次微分方程式を満たしている．ただし，もちろん，両者は境界条件については異なっている．すなわち，$G^{+}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)$ は $t'<t$ に対しては零になる（36.24）の解であり，$G^{-}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)$ は $t'>t$ に対して零になる

(36.24) の解なのである.

36-7 シンボル的な関係式

これまでの三つの小節で求められた Green 関数に対する積分方程式を，それ自体利用価値の多いシンボリックな形式に書き表わすことができる．方程式 (36.17) およびそれに対応する G^- に対する方程式は次のように書くことができる.

$$G^{\pm}=G_0^{\pm}+\hbar^{-1}G_0^{\pm}VG_0^{\pm}+\hbar^{-2}G_0^{\pm}VG_0^{\pm}VG_0^{\pm}+\cdots \tag{36.25}$$

同じようなふうにして，(36.18) を次のような形に書くことができる.

$$G^{\pm}=G_0^{\pm}+\hbar^{-1}G_0^{\pm}VG^{\pm} \tag{36.26}$$

さらに，(36.24) の微分方程式とそれに対応する G^- に対する方程式は次の形に書くことができる.

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{\hbar}H\right)G^{\pm}=1 \tag{36.27}$$

ただしダッシュ記号は落してある．H中のVの項を落とせば，(36.27) の代わりに次の関係が得られる.

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{\hbar}H_0\right)G_0^{\pm}=1 \tag{36.28}$$

以上の 4 個の関係が互いに矛盾なく成立するかどうかについては，いろいろなやり方が確かめることができる．(36.26) の両辺に左からシンボリックに $i(\partial/\partial t)-(1/\hbar)H_0$ をかけてみると次の関係が得られる.

$$\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{\hbar}H_0\right)G^{\pm}=\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{\hbar}H_0\right)G_0^{\pm}\left(1+\frac{1}{\hbar}VG^{\pm}\right)=1+\frac{1}{\hbar}VG^{\pm}$$

この場合 (36.28) を利用してあるが，その結果は (36.27) と一致している．もう一つの両立性の検証として，(36.26) を次のような形に書いてみる.

$$(1-\hbar^{-1}G_0^{\pm}V)G^{\pm}=G_0^{\pm}$$

これはまた次のように書くこともできる.

$$G^{\pm}=(1-\hbar^{-1}G_0^{\pm}V)^{-1}G_0^{\pm} \tag{36.29}$$

逆演算子のベキ級数への形式的な展開式を使うと，これは

$$G^{\pm}=(1+\hbar^{-1}G_0^{\pm}V+\hbar^{-2}G_0^{\pm}VG_0^{\pm}V+\cdots)G_0^{\pm}$$

となり，(36.25) に他ならない．このような意味での逆演算子を使って正しい結果が得

られることから，(36.27) および (36.28) をそれぞれ次のように書き表わしてよいことが示唆される．

$$G^{\pm}=\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{\hbar}H\right)^{-1} \quad \text{および} \quad G_0{}^{\pm}=\left(i\frac{\partial}{\partial t}-\frac{1}{\hbar}H_0\right)^{-1} \tag{36.30}$$

たとえこのようなシンボリックな取扱いが新しい関係の成り立つことを示唆するという点で発見法的に価値があることが少なくないにしても，この種の取扱いをその種の関係の導き方ないしは証明とみなすことがいつまでも可能であるわけではない．特に，(36.29) や (36.30) にあらわれているタイプの逆演算子はしばしば特異性を示し，その特異性の解釈については特別の注意をはらわねばならないのである．この点についての一つの例として，遅延および先進の Green 関数はいずれも (36.30) では同一のシンボリックな表式によって与えられていることを注意しておこう．逆演算子における特異性を適切に取扱えば時間についての前向きと後向の伝播を区別する境界条件を与えるようにすることができるということは，§37 において示すことにする．

36-8 散乱への応用

こゝでこれまでに展開してきた理論形式を散乱がおこっている情況に適用してみることができる．Vはずっと遠い過去または遠い未来には効いていないものと考えておく．したがって，T_1 と T_2 を長いが有限の時間として，$t<-T_1$ および $t>T_2$ に対しては H を H_0 で置き換えることができる．このことは，Vがある時刻に作用しはじめ，その後の時刻に作用がきられたためとしてもよいし，最初と最後の状態が散乱ポテンシャルの外部にある波束から構成されているためであるとしてもよい．ともかく自由粒子の波動関数を $\phi_\alpha(\mathbf{r},t)$ とすると，これらは (36.1) でVを零とおいた方程式を満足している．これらの ϕ_α はそれぞれの時刻で一つの完全関数系をつくっており，さらに便宜上規格直交系になるように選ばれているとする．；問題3で証明されるように，この直交性は時間について保存されている．それぞれの ϕ_α には，Vが効いてくるより前の遠い過去のある時刻 $t(t<-T_1)$ を出発点としている ϕ_α から生じている一つの波動関数 $\psi_\alpha{}^+(\mathbf{r},t)$ が付随している．$\psi_\alpha{}^+$ は (36.1) を満たすから，(36.5) にしたがってそれは次のような形に書くことができる．

$$\psi_\alpha{}^+(\mathbf{r}',t')=i\int G^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\phi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r \qquad t<-T_1 \tag{36.31}$$

ただしここでは $\theta(t'-t)$ は省略しておいてよい．この $\psi_\alpha{}^+$ は t に対して選ばれた正確な値には，それが $-T_1$ よりも小さい限り，無関係である．

V が再び効かなくなっているような遠い未来のある時刻 $(t>T_2)$ においては，$\psi_\alpha{}^+$ は自由粒子の Schrödinger 方程式の一つの解になり，したがってそれは定数係数をもつ ϕ_α についての一般化された和として表わしうるものであるはずである．このとき

$$(\beta|S|\alpha)\equiv(\phi_\beta, \psi_\alpha{}^+) \qquad t'>T_2 \tag{36.32}$$

という量は，散乱が起こってしまった後で，散乱以前に自由粒子状態 α であったものから生じた状態中に含まれている自由粒子状態 β の振幅である．このときもやはり，この値は t' に対して選ばれた正確な値には，それが T_2 よりも大きい限り，無関係になっている．(36.32) は α から β への遷移に対する振幅になっており，**散乱行列** *scattering matrix* あるいは **S 行列** *S-matrix*[1] の行列要素を定義しているものである．

(36.31) を (36.32) に代入すれば，S 行列要素に対するより対称的な形式が得られる．

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=i\iint\phi_\beta{}^*(\mathbf{r}',t')G^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\phi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r'd^3r$$
$$t<-T_1 \qquad t'>T_2 \tag{36.33}$$

自由粒子に対する (36.7) の方程式の複素共役をとったものと (36.12) とから得られる次の方程式を利用すれば，S 行列要素に対する他の形式を求めることができる．

$$\theta(t-t')\phi_\beta{}^*(\mathbf{r}',t')=i\int G_0{}^{-*}(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)\phi_\beta{}^*(\mathbf{r},t)d^3r$$
$$=i\int\phi_\beta{}^*(\mathbf{r},t)G_0{}^+(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')d^3r \tag{36.34}$$

つまり，(36.17) を使って (36.33) の G^+ を書き直し，そこえ (36.5) および (36.34) を用いると，次の結果に導かれる．

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=\langle\beta|\alpha\rangle-\frac{i}{\hbar}\iint\phi_\beta{}^*(\mathbf{r},t)V(\mathbf{r},t)\phi_\alpha(\mathbf{r},t)dt\,d^3r$$
$$-\frac{i}{\hbar^2}\iiiint\phi_\beta{}^*(\mathbf{r}',t')V(\mathbf{r}',t')G_0{}^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)V(\mathbf{r},t)\phi_\alpha(\mathbf{r},t)dt'd^3r'dt\,d^3r$$
$$-\cdots \tag{36.35}$$

---

1) J. A. Wheeler, *Phys. Rev.* **52**, 1107 (1937); W. Heisenberg, *Z. Naturforsch.* **1**, 608 (1946); C. Møller, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-Fys. Medd.* **23**, 1 (1948).

ただし，$\langle\beta|\alpha\rangle\equiv\int\phi_\beta^*(\mathbf{r},t)\phi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r$ で，これは t に関係しない．(36.18) を使って G^+ を書き直してやれば同じようにして

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=\langle\beta|\alpha\rangle-\frac{i}{\hbar}\iint\phi_\beta^*(\mathbf{r},t)V(\mathbf{r},t)\psi_\alpha^+(\mathbf{r},t)dt\,d^3r \tag{36.36}$$

となる．(36.35) および (36.36) 中の時間についての積分はいずれも少なくとも $-T_1$ から T_2 までにわたるもので，要するにVが効いている全時間間隔を含むものである．

先進 Green 関数 G_0^- および G^- を使っても，S行列要素に対する以上のものとよく似た表式を求めることができる．たとえば，それぞれの ϕ_α に付随して，Vが効かなくなっている遠い未来のある時刻 ($t>T_2$) において ϕ_α になるような波動関数 $\psi_\beta^-(\mathbf{r},t)$ が存在する．この波動関数は (36.7) でダッシュのついた変数とダッシュのつかない変数とを入れ替えたものを利用することによって，次のような形に書き表わすことができる．

$$\psi_\beta^-(\mathbf{r},t)=-i\int G^-(\mathbf{r},t\,;\,\mathbf{r}',t')\phi_\beta(\mathbf{r}',t')d^3r' \qquad t'>T_2 \tag{36.37}$$

そうすれば，αからβへの遷移に対するS行列要素は，遠い過去のある時刻 ($t<-T_1$) での，ψ_β^- と ϕ_α との内積の値を求めることによって与えられることが予想されるだろう：つまり，

$$(\psi_\beta^-,\phi_\alpha)=i\iint G^{-*}(\mathbf{r},t\,;\,\mathbf{r}',t')\phi_\beta^*(\mathbf{r}',t')\phi_\alpha(\mathbf{r},t)d^3r'd^3r$$
$$t<-T_1 \qquad t'>T_2 \tag{36.38}$$

(36.22) の方程式から明らかなように，HがエルミチアンすなわちVが実の量であるならば，(36.38) は (36.33) で与えられる $\langle\beta|S|\alpha\rangle$ と実際に同一になっている．Vが複素量である場合に両者が喰い違ってくるということは物理的に納得できることである．というのは，(20.2) で示しておいたように，吸収ポテンシャル (Vの虚数部分にマイナス記号をつけたもの) はその状態に付随した全確率を時間とともに減少させるような働きをするからである．このことは今の場合次のことを意味する．つまり，$\psi_\alpha^+(\mathbf{r}',t')$ はそれがつくり出されてきたもとの ϕ_α に比べて，$t'>T_2$ においては一般により小さくなっているが，一方 $\psi_\beta^-(\mathbf{r},t)$ の方はそれが発展してゆく先の ϕ_β に比べて $t<-T_1$ においては一般により大きくなっている．したがって，Vが吸収的である場合には (36.38) は (36.32) よりも大きくなっていることが予想されるわけである．

36-9 S 行列のユニタリー性

S 行列の重要な性質の一つに，ハミルトニアンがエルミチアンであるならばそれはユニタリーであるということがある．このことを証明するには，$SS^\dagger=1$ であること，および $S^\dagger S=1$ であることを示さねばならない．この目的のためには，以上で求められた $\langle\beta|S|\alpha\rangle$ に対するいくつかの形式，あるいはそれらに対応する先進 Green 関数ないしは波動関数を含む表式の中のどれを使ってもよい．(36.33) の形を使うとすれば，$SS^\dagger$ の代表的な行列要素は次のようになる．

$$\langle\beta|SS^\dagger|\alpha\rangle=\mathrm{S}_\gamma\langle\beta|S|\gamma\rangle\langle\gamma|S^\dagger|\alpha\rangle=\mathrm{S}_\gamma\langle\beta|S|\gamma\rangle\langle\alpha|S|\gamma\rangle^*$$

$$=\mathrm{S}_\gamma\iint\phi_\beta{}^*(\mathbf{r}',t')G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)\phi_\gamma(\mathbf{r},t)d^3r'd^3r$$

$$\times\iint\phi_\alpha(\mathbf{r}'',t')G^{+*}(\mathbf{r}'',t'\,;\,\mathbf{r}''',t)\phi_\gamma{}^*(\mathbf{r}''',t)d^3r''d^3r'''$$

$$t<-T_1\qquad t'>T_2$$

S および $S^\dagger$ の双方の行列要素を通じて同じ時刻 t および t' を用いるのが便利である．このことはこれらの時刻で V が効いていない限り (36.33) は t,t' のとり方に無関係であるということによって許される．そうすれば，関数系 ϕ は完全かつ規格直交になっているから，γ について和をとれば $\phi_\gamma\phi_\gamma{}^*$ の場所に $\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}''')$ が導入されることになり，さらにそこで (36.22) を利用すれば結局次の結果が得られる．

$$\langle\beta|SS^\dagger|\alpha\rangle$$

$$=\iiint\phi_\beta{}^*(\mathbf{r}',t')G^+(\mathbf{r}',t'\,;\,\mathbf{r},t)G^-(\mathbf{r},t\,;\,\mathbf{r}'',t')\phi_\alpha(\mathbf{r}'',t')d^3r'\,d^3r\,d^3r''$$

ここで (36.8) の第三の関係式からわかるように，2個の Green 関数の積の d^3r についての積分は $\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r}'')$ を与える．したがって，この式の右辺は $\langle\beta|\alpha\rangle$ に他ならない．$S^\dagger S=1$ であることも同様なやり方で証明される．[1]

---

1) V が過去および未来の有限の時刻にその作用が始まりかつ終るものである以上，ここで与えられている S のユニタリー性に対する証明は満足すべきものである．もしも V が文字通り時間的に一定であって，系の初期および最終状態が V の作用範囲の外部にある波束から構成されるためにははるかに遠い過去および未来には V が効かなくなっているという場合には，事情はいいさか込み入ったものになる．事情を複雑化する因子の一つは，H が束縛状態をもつことがありうるということである．そしてこの場合には，波束の状態はこれらの束縛状態に対して直交しており，したがってそれらは一つの完全系をつくっていないということを証明することができるということである．けだし，系がこれらの束縛状態を占めるということはエネルギー保存ということのために起こらないということがあって，V が実の量であるならば S はやはりユニタリーになっているのである．より立

36-10　S 行列の対称性

S 行列がその基礎になっているハミルトニアンの対称性を反映する種々の対称性をもつであろうことは予想されるところである．この予想が事実であることを示すために，第VII章で論じたあるユニタリー演算子によって表わすことのできる対称操作（空間あるいは時間の変位，回転，あるいは空間反転）の一つをまず最初に考えよう．任意のこの種の演算子 U は H_0 と可換であるから，ある自由粒子状態 ϕ_β を，その系の可能な自由運動を表わすもう一つの状態 $\phi_{\beta'}=U\phi_\beta$ に変換することになる．その上に，もしも U が H とも可換であるならば，この U は $\psi_\alpha{}^+$ を相互作用 V が存在する際にやはり系の可能な運動を表わしている状態 $\psi_{\alpha'}{}^+=U\psi_\alpha{}^+$ に変換することになる．したがって，これら変換された状態間の S 行列要素は，(36.32) で与えられているように，

$$\begin{aligned}\langle\beta'|S|\alpha'\rangle&=(\phi_{\beta'},\psi_{\alpha'}{}^+)=(U\phi_\beta,U\psi_\alpha{}^+)\\&=(\phi_\beta,U^\dagger U\psi_\alpha{}^+)=(\phi_\beta,\psi_\alpha{}^+)=\langle\beta|S|\alpha\rangle\end{aligned}\tag{36.39}$$

となる．ただし，これらの値はすべて $t'>T_2$ に対してとられるものとする．たとえば，ある球対称なポテンシャルによって引き起こされた任意の一対の状態間の散乱に対する振幅は，元の一対をつくっている 2 個の状態を同じように回転して得られる状態間の散乱に対する振幅と数値的に等しくなる．

(36.39) の左辺はまた $\langle\beta|U^\dagger SU|\alpha\rangle$ と書いておいてもよい．そうすれば $|\alpha\rangle$ および $|\beta\rangle$ は任意であるから，結論として

$$U^\dagger SU=S \qquad \text{または} \qquad [U,S]=0\tag{36.40}$$

ということになる．つまり，もしも U が H と可換であるとすれば，U はまた演算子 S とも可換になるわけである．

時間反転については，§29 で議論されたように，反ユニタリーな演算子となり，そのため事情はいささか複雑なものになる．時間反転の演算子 T はある自由粒子状態 ϕ_β を逆向きにされた線運動量および角運動量に対応する別の自由粒子状態へ変換する．；その意味で変換された状態を $\phi_{-\beta}$ という記号で表わすことにする．ただし，(29.12) に

ち入った議論については次のものを見られたい．C. Møller（前掲論文）；"Lecture Notes of Blandeis University 1959 Summer Institute in Theoretical Physics" 中の F. E. Low のもの；W. Brenig and R. Haag, *Fortschr. Physik* 7, 183 (1959), の第 1 節．この論文の英訳は (M. Ross 編) "Quantum Scattering Theory" (Indiana University Press, Bloomington, Ind. 1963) に発表されている．なおそれ以外には Goldberger and Watson（前掲書）および Newton（前掲書）がある．

ついての議論によれば，Tを用いた演算はさらに時間の進行の向きを逆転する．したがって

$$T\phi_\beta=\phi_{-\beta}(-t) \tag{36.41}$$

である．たとえば，スピンをもたない粒子に対して $\phi_\beta(t)=C\exp i(\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r}-\omega_\beta t)$ とすれば，(36.41) と (29.13) から $\phi_{-\beta}(t)=C^*\exp i(-\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r}-\omega_\beta t)$ となるが，これは予想通りの結果である．

ところでTがHと可換，つまり相互作用系が時間反転に関して不変であるとする．この種の情況として最も簡単なのは，Vが $t=\pm T_0$ で対称的に作用し始め，切られるという点を除いて時間的に一定である場合である．この種の場合には，Tは $\psi_\alpha{}^+$ をやはりその系の一つの可能な運動を表わしている一つの状態に変換することになる．この変換された状態は逆向きの運動量・角運動量をもつばかりでなく，遠い過去に $\phi_{-\alpha}$ から生じてきているという代わりに遠い未来に $\phi_{-\alpha}$ に発展してゆくものになっている．；その意味でこれを $\psi^-_{-\alpha}$ で表わすことにする．ここでもやはり，Tを用いた演算はさらに時間の進行の向きを逆にするので，(36.41) に対応する関係としては，

$$T\psi_\alpha{}^+(t)=\psi^-_{-\alpha}(-t) \tag{36.42}$$

となる．

時間反転に対して不変な系，したがってHがエルミチアンあるいはVが実の量になっている場合には，(36.38) に関する議論から明らかなように，あるS行列要素を次の形に書くことができる．

$$\langle-\alpha|S|-\beta\rangle=(\psi^-_{-\alpha}(t),\phi_{-\beta}(t))_{t<-T_0}=(\psi^-_{-\alpha}(-t),\phi_{-\beta}(-t))_{t>T_0}$$

ここで (36.41) と (36.42) を上の表式に代入して，(29.13) を用いると，

$$\begin{aligned}\langle-\alpha|S|-\beta\rangle&=(T\psi_\alpha{}^+(t),T\phi_\beta(t))=(UK\psi_\alpha{}^+(t),UK\phi_\beta(t))\\&=(K\psi_\alpha{}^+(t),K\phi_\beta(t))=(\phi_\beta(t),\psi_\alpha{}^+(t))\\&=\langle\beta|S|\alpha\rangle\end{aligned} \tag{36.43}$$

となる．ただしすべて $t>T_0$ に対する値をとるものとする．(36.43) の方程式は次のことを示している．すなわち，系が時間反転に対して不変であるならば，ある始状態αからある終状態βへの散乱に対する振幅は，終状態の運動量を逆にした状態 $-\beta$ から始状態の運動量を逆向にした状態 $-\alpha$ への散乱に対する振幅と数値的に等しい．この結果は，§20 でVが複素量である場合にも成立することを証明しておいた相反性の定

理［(20.16) 式］に他ならない．

37□定常的な衝突の理論

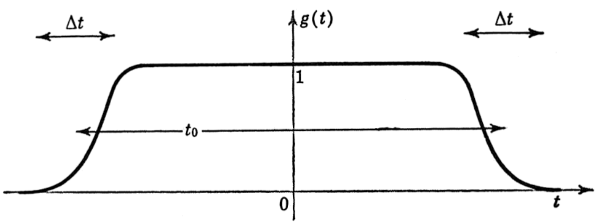
前節で説明してきたS行列理論は，十分遠い過去および未来における有限な時間に対して，自由粒子状態を定義することができるという制限に従う，という点を除けば，Hが時間に関して任意の変化を示す可能性を許すものになっている．原理的にはどんな散乱問題でも定式化することが可能であることを示すためには，この種の包括的な理論形式をつくって見せるということは興味のあることであるにしても，直接役に立つ結果というものは，一般にいくつかの特殊な場合についてのみ得ることができる．その中でも物理的に最も興味のある情況は，ある時刻にVの作用が始まり，その後のある時刻にその作用が切られることを除いてはVが時間を含まないという場合である．

このような定常的な情況を考えてゆくに当って先ず最初は，ある極めて長いがしかし有限の時間 t_0 の間中Vが効いているものとしよう．この場合，ある特定のS行列要素を単位時間当りの遷移確率に関係づけることが可能になる．そのやり方は §35 で説明した時間を含まない摂動論でのやり方と同様なものであるが，ただしこの場合のやり方はVが小さな摂動である場合に制限されないことになる．次にさらに一歩を進めて，この遷移確率を散乱断面積に結びつけることにする．こうした議論の後で，t_0 が無限大になる極限，つまり情況が厳密な意味で定常的になっている場合に対する別の取扱いを展開することにする．この場合には，遷移確率を使って考えることは余り意味がないわけで，むしろ散乱の振幅および断面積を直接求めることになる．

37-1 遷移行列

S行列要素 $\langle\beta|S|\alpha\rangle$ を指定するのに用いられる始めと終りの自由粒子状態 ϕ_α と ϕ_β は，はっきり定まったエネルギーをもっているように選ぶことができる．さらに，Vが効き始めてから一定値になるまでに要する時間およびVが切られ始めてから零になるまでに要する時間はいずれも Δt のオーダーであり，それらの間ではVは Δt に比べてはるかに長い時間 t_0 にわたって一定であるものとしよう．$g(t)$ を第34図に示されているような一般形をもつ関数とすれば，このことは $V(\mathbf{r},t)$ を $V(\mathbf{r})g(t)$ で置き換えること

を意味している．そうすれば，Vg の時間についての Fourier 変換は零の周囲の $1/\Delta t$ のオーダーの範囲にわたる振動数を含むことになる．(36.36) からわかるように，$\langle\beta|S-1|\alpha\rangle$ は $\psi_\alpha{}^+$ に対応するエネルギーが ϕ_β に対応するエネルギーの近傍で $\hbar/\Delta t$ のオーダーの範囲におさまっていない限り極めて小さくなる．そこでこのエネルギーの幅が実験的に観測可能なものにならない程度に Δt を十分大きくすることができるものと仮定しよう．さらにまた，V の時間的な効き方についての不確定性が重要にならない程度に，t_0 は Δt に比べて十分大きくすることができるものと仮定しておく．以上のことは，V があるはっきり定まった時間にわたって効いているとすることができると同時に，散乱過程を通じてエネルギーは実質的に保存されていることを意味するものである．



第34図 V の時間的変化をきめている関数 $g(t)$

以上の物理的情況に留意して，次のようにおくことにする．

$$\phi_\alpha(\mathbf{r},t)=u_\alpha(\mathbf{r})e^{-i\omega_\alpha t}\qquad (H_0-E_\alpha)u_\alpha(\mathbf{r})=0$$
$$\psi_\alpha{}^+(\mathbf{r},t)=\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})e^{-i\omega_\alpha t}\qquad (H-E_\alpha)\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})=0 \tag{37.1}$$

ただし，$E_\alpha=\hbar\omega_\alpha$ で，$V(\mathbf{r},t)$ は $V(\mathbf{r})g(t)$ で置き換えることができるものとする．そうすれば，(36.36) を使って**遷移行列** *transition matrix* あるいは ***T* 行列** *T matrix* の要素は次式で定義されることになる．

$$\langle\beta|(S-1)|\alpha\rangle=-\frac{i}{\hbar}\langle\beta|T|\alpha\rangle\int_{-\infty}^{\infty}g(t)e^{i\omega_{\beta\alpha}t}dt$$
$$\langle\beta|T|\alpha\rangle\equiv\int u_\beta{}^*(\mathbf{r})V(\mathbf{r})\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})d^3r\qquad \omega_{\beta\alpha}\equiv\omega_\beta-\omega_\alpha \tag{37.2}$$

37-2 遷移確率

散乱行列の定義 [(36.32)] から明らかなように，$|\langle\beta|S|\alpha\rangle|^2$ はもともと状態 α にある系が最終的には状態 β にあることが見出される確率である．α と β とが異なった状態で

ある限り，これは $|\langle\beta|(S-1)|\alpha\rangle|^2$ に等しく，そこで (37.2) を使って遷移確率を計算することができる．ところでもしも第34図で $\Delta t=0$ と仮定することができるとすれば，情況は (35.12) の方程式と第31図に関連して述べたときと同様なものになってしまうことになる．この点をさけるために，$g(t)$ に対してそのような矩形型のものを仮定することはしないことにしよう．

散乱問題における始めと終りの状態は連続的に分布しているか，あるいは箱に入れる規格化が用いられている場合には殆ど連続的に分布している．したがって，殆ど同じエネルギーをもつ終状態の一つのグループが常に存在していて，このグループに対しては $\langle\beta|T|\alpha\rangle$ は大体 β によらないことになる．この種の状態のグループはまたこれらの状態を指定するエネルギー以外の他のすべてのパラメーターについても殆ど同じ値をもつことになる．たとえば，終状態が運動量の固有関数である場合には，状態 β は運動量ベクトルの大きさについてと同時に，その方向についてのある小さな領域によって特徴づけられることになる．これらの状態の個数を $\rho(\beta)dE_\beta$ と書くことにする．ただし，dE_β はエネルギーについて領域で，$\rho(\beta)$ は明らかに他のパラメーターについては一つの微分量である．したがってこの終状態のグループの中のどれか一つの状態に系を見出す全確率は $|\langle\beta|(S-1)|\alpha\rangle|^2$ の和になる：

$$\int|\langle\beta|(S-1)|\alpha\rangle|^2\rho(\beta)dE_\beta$$
$$=\hbar^{-2}\int|\langle\beta|T|\alpha\rangle|^2\left|\int_{-\infty}^{\infty}g(t)e^{i\omega_{\beta\alpha}t}dt\right|^2\rho(\beta)\hbar d\omega_{\beta\alpha}$$

ただし ω_α は定数であるから dE_β を $\hbar d\omega_{\beta\alpha}$ で置き換えてある．ところで，$g(t)$ の Fourier 変換は $\omega_{\beta\alpha}=0$ において強くピークをつくっているので，$\rho(\beta)|\langle\beta|T|\alpha\rangle|^2$ を $\omega_{\beta\alpha}$ についての積分の中から外へとり出して，積分の上・下限を $\pm\infty$ にまで延長することができる．そうすれば積分は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\left|\int_{-\infty}^{\infty}g(t)e^{i\omega_{\beta\alpha}t}dt\right|^2d\omega_{\beta\alpha}=2\pi\int_{-\infty}^{\infty}|g(t)|^2dt$$

となり，$g(t)$ が第34図に示されている形をもつものであればこれは本質的には $2\pi t_0$ に等しい．したがって，単位時間当りの遷移確率は次式で与えられる．

$$w\equiv\frac{1}{t_0}\int|\langle\beta|(S-1)|\alpha\rangle|^2\rho(\beta)dE_\beta=\frac{2\pi}{\hbar}\rho(\beta)|\langle\beta|T|\alpha\rangle|^2 \tag{37.3}$$

方程式 (37.3) は正確な方程式である．(36.35) の右辺の第二項を (36.36) の

対応する項と比較してみればわかるように，(37.3) に対する摂動近似は (37.2) において χ_α^+ を u_α で置き換えることによって得られる．この置き換えは Fermi のいう“黄金則第2号”[1] を与えることになる．

37-3 散乱断面積

微分散乱断面積に対する表式を求めるのは，箱による規格化を用いて (37.3) から求めるのが最も便利である．u_β として次の運動量の固有関数を選ぶことにする．

$$u_\beta(\mathbf{r}) = L^{-\frac{3}{2}} \exp(i\mathbf{k}_\beta \cdot \mathbf{r})$$

この場合の $\rho(\beta)$ は (35.18) で与えられており，

$$\rho(\beta) = \frac{\mu L^3}{8\pi^3 \hbar^2} k_\beta d\Omega_\beta \tag{37.4}$$

となる．ただし，$d\Omega_\beta$ に $\mathbf{k}_\beta$ の方向に付随している立体角の無限小要素である．

(37.4) を (37.3) に代入して得られる w の値は，体積 L^3 内に最初1個の系があるときに，単位時間当りに $d\Omega_\beta$ 内へ散乱される個数になっている．これは v_α を最初の相対速度とすれば単位面積当り v_α/L^3 の入射流束に当っている．微分散乱断面積は単位の入射流束当りの散乱として定義されているから，

$$\sigma(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\alpha) d\Omega_\beta = \frac{w}{v_\alpha/L^3}$$

となり，(37.4) の k_β を $\mu v_\beta/\hbar$ で置き換えておけば結局

$$\sigma(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\alpha) = \frac{v_\beta}{v_\alpha}\left(\frac{\mu L^3}{2\pi\hbar^2}\right)^2 |\langle\beta|T|\alpha\rangle|^2 \tag{37.5}$$

となる．ここで考えている弾性散乱の場合には，エネルギーは保存され，$v_\beta = v_\alpha$ である．

(37.2) の T 行列要素にあらわれる波動関数 u_β および χ_α^+ はそれぞれ体積 L^3 中に1個の系が見出されるように規格化されており，その結果 $\langle\beta|T|\alpha\rangle$ は $1/L^3$ に比例する．したがって，もちろん当然のことであるが，微分断面積は L に無関係になる．さらに注意すべきことは，w が (37.3) で与えられるとすると全遷移確率 wt_0 は t_0/L^3 に比例することになる．箱の中での規約化を用いるということは最終的には $L \to \infty$

1) E. Fermi, “Nuclear Physics” (University of Chicago Press, Chicago, 1950) の p. 142, なお (35.14) をも見よ．

の極限がとられることになることを意味している以上，t_0 を十分大きくした場合確率 wt_0 が 1 よりも大きくなる可能性があるという見かけの困難は，実際には起こらないのである．実際にはこの確率は $L\to\infty$ とともに t_0 の任意の有限値に対して零に近い小さい値になるのである．

37-4　定常的な場合の Green 関数

次に t_0 を無限大にした極限に適用可能な別の取扱いを説明してゆこう．情況は厳密に定常的になっており，エネルギーは厳密に保存されることになるわけである．この極限においても §36 で説明した S 行列の理論形式はそのまま成り立つことを仮定しておくことは必要である；このことは §36 の末尾近くの脚注で触れておいた波束による取扱い方の線に沿って示すことができる．ところで厳密に定常的な場合には単位時間当りの遷移確率を使って考えてゆくことはできないが，そのかわりに散乱の振幅および断面積を直接求めることになる．この厳密に定常的な情況の攻め方としては，時間を含まない Schrödinger 方程式から出発するのが最も容易であり，かつ最も直接的でもある．もう少し後になってこの種の手つづきに従うことにして，まず最初 §37.4 と §37.5 ではすでに §36 で議論した時間を含む Green 関数から出発する取扱いをもっぱら考えることにする．

(36.2) で定義された Green 関数 $G(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)$ に対する具体的な表式は，定常的な場合の (10.19) から容易に求められる．それはここでの記法を使えば次のようになる．

$$G(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)=-i\,\mathrm{S}_\alpha\,\chi_\alpha(\mathbf{r}')\chi_\alpha{}^*(\mathbf{r})e^{-i\omega_\alpha(t'-t)} \tag{37.6}$$

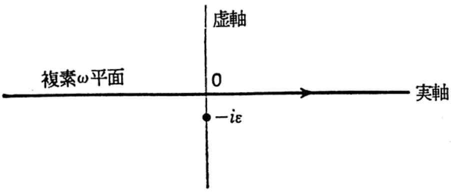
ただし，χ_α は時間を含む Schrödinger 方程式 $(H-E_\alpha)\chi_\alpha=0$ の解で完全規格直交系をつくっているものである．G が $t'-t$ だけについての関数であって，別々に t' および t についての関数になっていないという事実は，定常的な場合において H が時間をずらしていっても不変であるということの一つの結果なのである．(36.3) によって，伝播関数はこの G に $\theta(t'-t)$ をかければ求めらる．(37.6) の G の形が時間差 $t'-t$ についての Fourier 展開に似ていることから，$\theta(t'-t)$ を Fourier 展開の形に書き表わすことにすれば，時間を含む部分をまとめてくくり出すことができそうに思われる．そこで，まづこの θ のFourier 展開形式は次の形になることを証明することにしよう．

$$\theta(\tau)=\lim_{\epsilon\to 0^+}-\frac{1}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega\tau}\frac{d\omega}{\omega+i\epsilon} \tag{37.7}$$

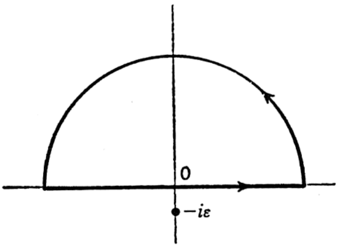
まず第一に気がつくことは，(36.23) から期待されるように，この表式を τ について微分してみれば

$$\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega\tau}d\omega$$

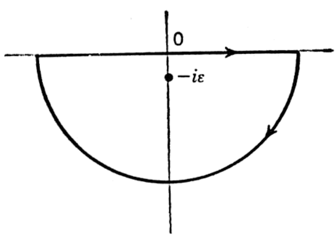
となり，(11.10) によってこれは $\delta(\tau)$ に等しいということである．この結果は (37.7) での被積分関数の分母を $\omega+i\epsilon$ か $\omega-i\epsilon$ かのいづれに選ぶか，つまり被積分関数の極が実軸に沿ってとられている積分路の下か上かのいずれにあるか，には関係しない．最初の選び方は図35a に示されているような $-i\epsilon$ における一つの極に対応している．$\tau<0$ に対しては，図35b のように虚数部分が正の上半面での無限半円を使ってこの積分路を



(a)



(b)



(c)

第35図 (37.7) の積分路

閉じさせることができる．つまり，この無限半円上では指数関数はいくらでも小さくなるわけで，結局積分には何も寄与しないことになるからである．；したがって $\theta(\tau)=0$. $\tau>0$ に対しては図35c にあるように積分路を閉じさせることができ，このときの積分は積分路の内部にある唯一の極（$\omega=-i\epsilon$）での被積分関数の留数の $-2\pi i$ 倍に等しいことになる．したがってこの場合には $\epsilon\to0^+$ の極限において $\theta(\tau)=1$ となる．分母に対して $\omega-i\epsilon$ というもう一つの選び方をすれば，その結果は (36.4) ではなくて $\theta(\tau)-1$ になることは容易に証明される．

次に（37.6）と（37.7）とを一緒にして $G^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)$ に対する表式を求めよう．それには積分変数を ω から $\omega+\omega_\alpha$ に変え，さらに G^+ を Fourier 積分の形に書き換えておくのが便利である：すなわち

$$
\begin{aligned}
G^+(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)&=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}G_\omega{}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})e^{-i\omega(t'-t)}d\omega\\
G_\omega{}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})&\equiv \mathrm{S}_\alpha(\omega-\omega_\alpha+i\epsilon)^{-1}\chi_\alpha(\mathbf{r}')\chi_\alpha{}^*(\mathbf{r})
\end{aligned}
\tag{37.8}
$$

ただし，右辺の表式は常に $\epsilon\to0^+$ の極限を意味しているものとする．容易に確かめられるように先進 Green 関数 $G^-(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)$ と $G_\omega{}^-(\mathbf{r}',\mathbf{r})$ とはお互いに（37.8）の最初の方程式で結びついており，$G_\omega{}^-$ は（37.8）の第二の関係式で和をとる項の分母の $+i\epsilon$ を $-i\epsilon$ で置き換えたもので与えられる．χ_α の完全性と直交性とから $G_\omega{}^\pm$ が（36.24）と類似の次の形の方程式を満足することも証明することができる．

$$
\left(\omega-\frac{1}{\hbar}H'\right)G_\omega{}^\pm(\mathbf{r}',\mathbf{r})=\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r}) \tag{37.9}
$$

ただし，H' は $\mathbf{r}'$ を使ってあらわしたHである．

37-5 逆演算子としての Green 関数

ここまできて始めて（36.30）という逆演算子をどのように具体的に書き下すことができるかがわかることになる．つまり（36.27）の直前で落しておいたダッシュ記号を復活させることにすると，（36.30）の最初の方程式は次のようになる．

$$
\begin{aligned}
G^\pm(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)&=\left(i\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{1}{\hbar}H'\right)^{-1}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t'-t)\\
&=\left(i\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{1}{\hbar}H'\right)^{-1}\mathrm{S}_\alpha\,\chi_\alpha(\mathbf{r}')\chi_\alpha{}^*(\mathbf{r})\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}e^{-i\omega(t'-t)}d\omega
\end{aligned}
$$

ここでは，$\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$ の書き換えに χ_α の完全性関係が，$\delta(t'-t)$ の書き換えには

(11.10) の方程式が利用してある．ところで，和と積分の対象になっている関数の典型的な項である $\chi_\alpha(\mathbf{r}')e^{-i\omega t'}$ は演算子 $i(\partial/\partial t')-(1/\hbar)H'$ の固有値 $\omega-\omega_\alpha$ をもつ一つの固有関数である．したがって，この演算子の任意の関数がこの典型的な項に作用している場合，これを固有値の同じ関数で置き換えてみる．このような置き換えをすることにすれば，$G^\pm$ に対して次の表式が得られる．

$$G^\pm(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)=\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{S}_\alpha(\omega-\omega_\alpha)^{-1}\chi_\alpha(\mathbf{r}')\chi_\alpha^*(\mathbf{r})e^{-i\omega(t'-t)}d\omega$$

これは (36.30) の直ぐ後で触れておいて特異性の一つの例になっている．つまり，ω_α にある極が実軸から除かれていない限り ω についての積分ははっきり定義されていないことになる．被積分関数の分母で $\omega-\omega_\alpha$ を $\omega-\omega_\alpha\pm i\epsilon$ と置き換えることによってこのことが達成されているとすることができ，さらにそれによって (37.8) で得られたような正しい $G^\pm$ が導かれることになる．つまり，$\pm i\epsilon$ を挿入することは特異点を取り除くと同時に，Green 関数が時間について前方または後方のいづれに伝播するかを指定することになるのである．

37-6 定常的な伝播関数

(37.8) で定義された定常的な Green 関数 $G_\omega^\pm(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ は時間を含む Green 関数 $G^\pm(\mathbf{r}',t';\mathbf{r},t)$ の Fourier 変換になっているが，これはまた時間を含まない Schrödinger 方程式から直接求めることもできる．定常的な散乱問題に際して興味があるのは，(18.10) にあるような平面波プラス外向きの散乱波という漸近形をもつ方程式の解である．この解に付随している伝播関数は G_ω^- ではなくてむしろ G_ω^+ であることが予想される．というのは，$\psi_\alpha^+(\mathbf{r},t)$ は (36.31) において V が効いてくる以前の遠い過去のある時刻から出発している自由粒子波動関数 $\phi_\alpha(\mathbf{r},t)$ から生じる波動関数として定義されたものであるからである．(37.1) にしたがって，この定常的な解を $\chi_\alpha^+(\mathbf{r})$ とよぶことにして，それを次の形に書いておく．

$$\chi_\alpha^+(\mathbf{r})=C[\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r})+v(\mathbf{r})]=u_\alpha(\mathbf{r})+Cv(\mathbf{r}) \qquad (37.10)$$

ただし，$u_\alpha(\mathbf{r})$ は (37.1) に定義された，適当に規格化した平面波である．つまり，係数 C は箱を使った規格化の場合には $L^{-\frac{3}{2}}$ に等しく，連続体の場合すなわち δ 関数による規格化の場合には $(2\pi)^{-3/2}$ に等しくなる（§11 を見よ）．χ_α^+ に付随している散

乱波は外向きであるから，$v(\mathbf{r})$ の漸近形は，(18.10) との類推から次のような形に書くことが許される．

$$v(\mathbf{r}) \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{1}{r} f(\mathbf{k}_r, \mathbf{k}_\alpha) e^{ik_\alpha r} \tag{37.11}$$

ただし，散乱振幅 f 中にあらわれるベクトル $\mathbf{k}_r$ は大きさ k_α と $\mathbf{r}$ の方向とをもつものである．係数 C が $\chi_\alpha{}^+$ に対しておよび u_α に対して同一になっていることを注意しておくことは重要である．つまり $v(\mathbf{r})$ は規格化の積分には無視しうる程度にしか寄与しないわけである．さらに注意すべきことは，この手つづきは V が複素量の場合にも全く同様に成立することである．というのは，(E_α が実数になる) 定常的な散乱の解はいつでも求めることができるからである．

(37.10) を波動方程式に代入すると，

$$[H_0 + V(\mathbf{r}) - E_\alpha]\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r}) = 0$$

となり，これから明らかなように $v(\mathbf{r})$ は次の非斉次微分方程式を満足する．

$$(H_0 - E_\alpha)v(\mathbf{r}) = -\frac{1}{C} V(\mathbf{r})\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})$$

この方程式は (37.9) を自由粒子について書き換えた方程式を利用して容易に解かれて，

$$v(\mathbf{r}') = (\hbar C)^{-1} \int G^+_{0\omega_\alpha}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \chi_\alpha{}^+(\mathbf{r}) d^3r \tag{37.12}$$

となる．(37.10) と (37.12) とを組み合せればわかるように，$\chi_\alpha{}^+$ は **Lippmann-Schwinger 方程式** *Lippmann-Schwinger Equation*[1] とよばれている一つの非斉次方程式を満足する．

$$\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r}') = u_\alpha(\mathbf{r}') + \hbar^{-1} \int G^+_{0\omega_\alpha}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) V(\mathbf{r}) \chi_\alpha{}^+(\mathbf{r}) d^3r \tag{37.13}$$

(37.9) を自由粒子について書き換えたものを利用することにすれば，この方程式を次のようにシンボリックに書くことができる．

$$\chi_\alpha{}^+ = u_\alpha + (E_\alpha - H_0 + i\epsilon)^{-1} V \chi_\alpha{}^+ \tag{37.14}$$

H_0 はエルミチアンであるから，その固有値は実数で，この逆演算子は ϵ が有限である限り特異性を示さないことになる．

(37.13) の方程式は，$\chi_\alpha{}^+$ に対する無限級数を与える反覆形に書き直すこともで

1) B. A. Lippmann and J. Schwinger, *Phys. Rev.* **79**, 469 (1950).

きて，それは次のようになる．

$$\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r}')=u_\alpha(\mathbf{r}')+\hbar^{-1}\int G_{0\omega_\alpha}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})V(\mathbf{r})u_\alpha(\mathbf{r})d^3r$$
$$+\hbar^{-2}\int\int G_{0\omega_\alpha}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r}_l)V(\mathbf{r}_l)G_{0\omega_\alpha}^+(\mathbf{r}_l,\mathbf{r})V(\mathbf{r})u_\alpha(\mathbf{r})d^3r_ld^3r+\cdots \tag{37.15}$$

(37.14) も純粋にシンボリックに式を運転するときには (37.14) はまた次のような形で使うことができる．

$$\chi_\alpha{}^+=u_\alpha+(E_\alpha-H+i\epsilon)^{-1}Vu_\alpha \tag{37.16}$$

(37.16) の関係をちゃんとした形で書けば次のように書かれるものであるからである．

$$\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r}')=u_\alpha(\mathbf{r}')+\hbar^{-1}\int G_{\omega_\alpha}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})V(\mathbf{r})u_\alpha(\mathbf{r})d^3r \tag{37.17}$$

(37.17) の方程式はシンボリックな関係式を利用しないでも導いてくることができる．

37-7 自由粒子伝播関数

(37.13) のような方程式を利用するためには，自由粒子伝播関数 $G_{0\omega}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})$ に対する具体的な表式が必要である．正の ω に対しては，(37.8) の第二の方程式から

$$G_{0\omega}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})=S_\alpha(\omega-\omega_\alpha+i\epsilon)^{-1}u_\alpha(\mathbf{r}')u_\alpha{}^*(\mathbf{r})$$
$$=\frac{\mu}{4\pi^3\hbar}\int(k^2-k_\alpha{}^2+i\epsilon)^{-1}\exp[i\mathbf{k}_\alpha\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})]d^3k_\alpha \tag{37.18}$$

となる．ただし，$k^2\equiv2\mu\omega/\hbar$．$H_0$ が空間的な変位に関して不変であるために，$G_{0\omega}^+$ は $\mathbf{r}'-\mathbf{r}$ だけの関数であって，$\mathbf{r}'$ および $\mathbf{r}$ の別々の関数にはならないのである．$\mathbf{r}'-\mathbf{r}$ を極軸にとり，これと $\mathbf{k}_\alpha$ とのなす角について積分すると，その結果は $\rho\equiv|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|$ として

$$G_{0\omega}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})=\frac{\mu}{\pi^2\hbar\rho}\int_0^\infty(k^2-k_\alpha{}^2+i\epsilon)^{-1}k_\alpha\sin k_\alpha\rho dk_\alpha$$

となる．この k_α についての積分の値を求めるには，積分の下限を $-\infty$ にまで延長し，$\sin k_\alpha\rho$ を指数関数の形に書き直しておいてから，(37.7) の評価のときにやったように留数の計算を利用するというやり方が一番手っとり早い．その結果は次のようになる．

$$G_{0\omega}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})=-\frac{\mu}{2\pi\hbar}|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^{-1}\exp(ik|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|)\qquad \omega>0$$
$$k=+\left(\frac{2\mu\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{37.19}$$

負の ω に対しては，指数因子中の i の符号を変えるだけになる．ただしこの場合には $k=+(2\mu|\omega|\hbar)^{\frac{1}{2}}$ である．結局，(37.8) の第一式で，ω の正および負の双方に対してこの置き換えを行なってみればわかるように，$G_0{}^+$ は $\mathbf{r}$ から $\mathbf{r}'$ に向って外向きに動径方向に進行する波の重ね合せになっており，この結果は (36.10) と一致している．

37-8 散乱振幅

ここまでくれば，(37.12) の漸近形を (37.11) と比べることによって，散乱振幅 $f(\mathbf{k}, \mathbf{k}_\alpha)$ を求めることができる．注意すべきことは，(37.12) の被積分関数中には $V(\mathbf{r})$ があらわれている以上，r の値は実質的には有限の値に制限されるということである．つまり，θ' を $\mathbf{r}'$ と $\mathbf{r}$ との間の角とすれば，$G_{0\omega_\alpha}^+$ の指数因子とおいては

$$|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|=r'-r\cos\theta'+O\left(\frac{r^2}{r'}\right)$$

であり，分母においては

$$|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^{-1}=r'^{-1}+O\left(\frac{r^2}{r'^2}\right)$$

となる．したがって，(37.19) は

$$G_{0\omega_\alpha}^+(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \longrightarrow -\frac{\mu}{2\pi\hbar r'}e^{ik_\alpha(r'-r\cos\theta')}$$

となり，これを (37.12) に代入すれば次の漸近形が得られる．

$$v(\mathbf{r}') \underset{r'\to\infty}{\longrightarrow} -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2 Cr'}e^{ik_\alpha r'}\int e^{-ik_\alpha r\cos\theta'}V(\mathbf{r})\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})d^3r. \tag{37.20}$$

ここで，(37.11) におけるベクトル $\mathbf{k}_r$ とよく似た，大きさ k_α と $\mathbf{r}'$ の方向をもつベクトル $\mathbf{k}_\beta$ を定義する．そうすれば $k_\alpha r\cos\theta'=\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r}$ で，(37.11) と (37.20) とを比較すれば，結局次の結果が得られる．

$$\begin{aligned}
f(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\alpha) &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2 C}\int \exp(-i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r})V(\mathbf{r})\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})d^3r \\
&= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2|C|^2}\int u_\beta{}^*(\mathbf{r})V(\mathbf{r})\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})d^3r \\
&= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2|C|^2}\langle\beta|T|\alpha\rangle
\end{aligned} \tag{37.21}$$

ただし T 行列要素は (37.2) で定義されているものである．(37.10) にしたがえば，u_β と $\chi_\alpha{}^+$ はいずれも漸近的に大きさ $|C|$ になるものであるから，至極当然のことなが

ら，この散乱振幅はCの選び方には無関係になっている．

(18.11) で示されているように，伝播ベクトル $\mathbf{k}_\alpha$ の始状態からの伝播ベクトル $\mathbf{k}_\beta$ の終状態への微分散乱断面積は $|f(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\alpha)|^2$ に等しい．したがって，(37.21) は箱による規格化を用いた (37.5) と一致しているわけである．

37-9 内 向 波

(37.13) から (37.19) までの方程式に次のような置き換えを行なってみると，その結果はやはり正しい方程式に書き直されていることは容易にわかる；

$$\chi_\alpha{}^+ \to \chi_\alpha{}^- \qquad G^+_{0\omega_\alpha}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \to G^-_{0\omega_\alpha}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \qquad i \to -i \tag{37.22}$$

(37.11) から類推すれば，$\chi_\alpha{}^-$ は次のような平面波プラス内向波という漸近形をもつことになる；

$$\chi_\alpha{}^-(\mathbf{r}) \longrightarrow C\left[\exp(ik_\alpha \cdot \mathbf{r}) + \frac{1}{r}f^-(\mathbf{k}_r, \mathbf{k}_\alpha)e^{-ik_\alpha r}\right] \tag{37.23}$$

次に，元の方程式と書き直した方程式とを比べてみれば明らかなように，Vが実の量であるとすれば

$$\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r}) = \chi^{-*}_{-\alpha}(\mathbf{r}) \qquad f(\mathbf{k}_r, \mathbf{k}_\alpha) = f^{-*}(\mathbf{k}_r, -\mathbf{k}_\alpha) \tag{37.24}$$

である．ここで $\chi^-_{-\alpha}$ は $\chi_\alpha{}^+$ に対する時間反転状態で，逆向きの運動量 $-\mathbf{k}_\alpha$ をもつものである．

やはりVが実の量である場合を考えているものとして，T行列要素を $\chi_\beta{}^-$ を使って書き直してゆくことができる．つまり，まず (37.2) と (37.16) とから，$E=E_\alpha=E_\beta$ として，

$$\begin{aligned}\langle\beta|T|\alpha\rangle &= (u_\beta, V\chi_\alpha{}^+) = (u_\beta, Vu_\alpha) + [u_\beta, V(E-H+i\epsilon)Vu_\alpha] \\ &= (u_\beta, Vu_\alpha) + [(E-H-i\epsilon)^{-1}Vu_\beta, Vu_\alpha]\end{aligned} \tag{37.25}$$

となる．(37.16) を (37.22) で書き直したものは，

$$\chi_\beta{}^- = u_\beta + (E-H-i\epsilon)^{-1}Vu_\beta$$

となり，したがって (37.25) から次のようになる．

$$\langle\beta|T|\alpha\rangle = (\chi_\beta{}^-, Vu_\alpha) \qquad V：実数量 \tag{37.26}$$

Vが複素量である場合の (37.26) に類似の表式をつくっておくと便利な場合が少なくない．そのために，波動関数 $\chi_\alpha{}^{T\pm}$ を定義する．ただしこれはVを V^* で置き換

えた Schrödinger 方程式の定常解，つまり

$$\chi_\alpha{}^{T\pm}=u_\alpha+(E-H_0\pm i\epsilon)^{-1}V^*\chi_\alpha{}^{T\pm}$$
$$=u_\alpha+(E-H^\dagger\pm i\epsilon)^{-1}V^*u_\alpha \tag{37.27}$$

となる．$\chi_{-\alpha}^{T-}$ は $\chi_\alpha{}^+$ に対する時間反転状態ではあるが，Hが時間反転に対して不変になっていないため，この系の物理的に可能な振舞いを表わすものにはなっていない．要するにこの場合の (37.26) にあたるものは次のようになる．

$$\langle\beta|T|\alpha\rangle=(\chi_\beta{}^{T-},Vu_\alpha)\qquad V：複素量 \tag{37.28}$$

37-10　定常的な場合の S 行列

S 行列要素に対する具体的な表式は，(37.2) の $g(t)$ で切り替えの時刻を $\pm\infty$ にまでひきのばすことにすることによって求めることができる．すなわち

$$\langle\beta|(S-1)|\alpha\rangle=-\frac{2\pi i}{\hbar}\delta(\omega_\beta-\omega_\alpha)\langle\beta|T|\alpha\rangle$$
$$=-\frac{2\pi\mu i}{\hbar^2k_\alpha}\delta(k_\beta-k_\alpha)\langle\beta|T|\alpha\rangle \tag{37.29}$$

ここでは (11.13) の第5式が利用されている．なお，$\langle\beta|\alpha\rangle$ に対する表式が必要になるが，それは連続体としての規格化を使えば次のようになる．

$$\langle\beta|\alpha\rangle=\delta^3(\mathbf{k}_\beta-\mathbf{k}_\alpha)=\frac{\delta(k_\beta-k_\alpha)}{k_\alpha{}^2}\;\frac{\delta(\theta_\beta-\theta_\alpha)}{\sin\theta_\alpha}\delta(\phi_\beta-\phi_\alpha) \tag{37.30}$$

ただしこれには球座標に対して適当な重みの関数を含ませてある．ここで (37.21), (37.29) および (37.30) を組み合せ $C=(2\pi)^{-\frac{3}{2}}$ としてやれば S 行列要素を求めることができる．

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=\frac{\delta(k_\beta-k_\alpha)}{k_\alpha{}^2}\left[\frac{\delta(\theta_\beta-\theta_\alpha)}{\sin\theta_\alpha}\delta(\phi_\beta-\phi_\alpha)+\frac{ik_\alpha}{2\pi}f(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)\right] \tag{37.31}$$

(37.31) の方程式と，Sがユニタリーであるという仮定とを一緒にして使うと，§20 で議論しておいた光学定理および一般化された光学定理を導き出すことができる．

37-11　角運動量表示

(37.31) の S 行列要素は始状態と終状態の伝播ベクトルの極座標を使って表わされている：

$$\langle\beta|S|\alpha\rangle=\langle k_\beta\theta_\beta\phi_\beta|S|k_\alpha\theta_\alpha\phi_\alpha\rangle$$

この形の行列要素をエネルギー（すなわち伝播ベクトルの大きさ）と角運動量によって指定される表示へ変換するには，(27.29) のユニタリー変換の行列，すなわち

$$\langle\theta\phi|lm\rangle = Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{37.32}$$

を利用すればよい．つまり，

$$\begin{aligned}&\langle k_\beta l_\beta m_\beta|S|k_\alpha l_\alpha m_\alpha\rangle\\&\quad= \mathrm{S}_{\theta_\beta\phi_\beta}\mathrm{S}_{\theta_\alpha\phi_\alpha}\langle l_\beta m_\beta|\theta_\beta\phi_\beta\rangle\langle k_\beta\theta_\beta\phi_\beta|S|k_\alpha\theta_\alpha\phi_\alpha\rangle\langle\theta_\alpha\phi_\alpha|l_\alpha m_\alpha\rangle\end{aligned} \tag{37.33}$$

となるわけであるが，一般化された和の記号はこの場合には角についての積分であり，同時に (27.29) の直ぐ後で注意したように重みの関数 $\sin\theta_\beta$, $\sin\theta_\alpha$ を含むことになる．

Vが球対称である場合には (37.33) は特に簡単な形をとる．というのはこの場合には (36.40) に従ってSは角運動量の演算子と可換になるからである．この場合の散乱振幅は $\mathbf{k}_\alpha$ と $\mathbf{k}_\beta$ との間の角 θ だけの関数になり，(19.11) にあるように次の形に書くことができる：

$$f(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha) = \frac{1}{2ik_\alpha}\sum_l (2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta) \tag{37.34}$$

この場合 $\cos\theta = \cos\theta_\beta\cos\theta_\alpha + \sin\theta_\beta\sin\theta_\alpha\cos(\phi_\beta-\phi_\alpha)$ で，さらに (32.10) と (14.16) によれば

$$P_l(\cos\theta) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l} Y_{lm}(\theta_\beta,\phi_\beta)Y^*_{lm}(\theta_\alpha,\phi_\alpha) \tag{37.35}$$

である．(37.31), (37.32), (37.34), (37.35) を (37.33) に代入して，球関数の規格直交性を利用すれば次の結果が得られる．

$$\begin{aligned}&\langle k_\beta l_\beta m_\beta|S|k_\alpha l_\alpha m_\alpha\rangle\\&\quad= \frac{\delta(k_\beta-k_\alpha)}{k_\alpha^2}\iiiint \sin\theta_\beta d\theta_\beta d\phi_\beta \sin\theta_\alpha d\theta_\alpha d\phi_\alpha Y^*_{l_\beta m_\beta}(\theta_\beta,\phi_\beta)\\&\qquad\times\Bigg[\frac{\delta_\beta(\theta_\beta-\theta_\alpha)}{\sin\theta_\alpha}\delta(\phi_\beta-\phi_\alpha) + \sum_l\sum_{m=-l}^{l}(e^{2i\delta_l}-1)\\&\qquad\qquad\times Y_{lm}(\theta_\beta,\phi_\beta)Y^*_{lm}(\theta_\alpha,\phi_\alpha)\Bigg]Y_{l_\alpha m_\alpha}(\theta_\alpha,\phi_\alpha)\\&\quad= e^{2i\delta_{l_\alpha}}\frac{\delta(k_\beta-k_\alpha)}{k_\alpha^2}\delta_{l_\beta l_\alpha}\delta_{m_\beta m_\alpha}\end{aligned} \tag{37.36}$$

つまりSは波数k（すなわちエネルギー）と角運動量量子数 l および m で指定された表示においては対角型になっている．球対称な静的ポテンシャルは衝突の過程を

通じてエネルギーあるいは角運動量のいずれをも変化させることがない以上，この結果は当然予想されるところである．S 行列のこの表示がユニタリーになっていることは，H がエルミチアンすなわち V が実数量である場合のように位相のずれ δ_l が実数であるものとすれば容易に証明される．さらに注意すべきことは，§19 の議論からわかるように，動径方向の内向波 $r^{-1}e^{-ikr}$ は部分波に分解する際に修正をうけることがないが，一方ある特定の l に対する外向波には $e^{2i\delta_l}$ の因子がかかってくる，ということである．つまり，散乱行列の対角要素の各々には，ある特定の外向波，すなわち散乱部分波をそれに対応する内向波すなわち入射部分波と比較したときに，それらがうけている補正としての自然な解釈が与えられるわけである．

38□近似的な計算

前節では，散乱振幅と T 行列要素との間の一つの厳密な関係［(37.21)］が導かれた．一方 T 行列要素の方は，(37.2) を介して定常的な外向波の解 $\chi_\alpha^+(\mathbf{r})$ を使って表わされ，さらにこの χ_α^+ の計算には (37.15) の無限摂動級数を利用することができる．この摂動級数の1次のオーダーから **Born 近似** *Born approximation*[1] が導かれるが，これは χ_α^+ を u_α で置き換えることに他ならない．まず最初，ポテンシャル散乱についてのいくつかの興味ある場合にこの方法がどのように適用しうるかを示し，次に内部自由度をもつ系による散乱（電子—原子散乱）の取扱いにそれがどのように一般化されうるかを示す．最後に，アイコナル近似を議論しておく．この近似は WKB 近似と密接に関連しているものである．

38-1　Born 近似

すぐ前のパラグラフで大筋を述べた手つづきによれば，散乱振幅に対する Born の式が直ちに導かれる：

$$f_\beta(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\beta) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2|C|^2}\int u_\beta^*(\mathbf{r})V(\mathbf{r})u_\alpha(\mathbf{r})d^3r$$

1) M. Born, *Z. Physik* **38**, 803 (1926). この方法が最初に利用されたのはおそらく Lord Rayleigh, *Phil. Mag.* **12**, 81 (1881) によってであると思われる．なお，R. Gans, *Ann. d. Physik* **72**, 29 (1925) をも見られたい．

$$= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})d^3r \qquad \mathbf{q}=\mathbf{k}_\alpha-\mathbf{k}_\beta \tag{38.1}$$

つまり Born の散乱振幅は散乱ポテンシャルの $\mathbf{q}$ に関する空間的 Fourier 変換に比例する．ただし，$\hbar\mathbf{q}$ は衝突を通じて入射粒子から散乱ポテンシャルに移される運動量である．このことは散乱振幅に対する摂動論の表式［(35.9)］にあらわれている時間的な Fourier 成分を思い出させるものである．ポテンシャル V が球対称であるならば，$\mathbf{q}$ を極軸にとってそれに関しての $\mathbf{r}$ の角について積分してしまうことによって，(38.1) を簡単化することが可能になる．この場合には，f_B は $\mathbf{k}_\alpha$ と $\mathbf{k}_\beta$ との間の角 θ だけの関数になる：

$$f_B = -\frac{2\mu}{\hbar^2 q}\int_0^\infty r\sin qrV(r)dr \qquad q=2k\sin\tfrac{1}{2}\theta \tag{38.2}$$

ただし，k は $\mathbf{k}_\alpha$ および $\mathbf{k}_\beta$ の大きさである．

(38.2) の応用の中で興味ある 1 例は，遮蔽された Coulomb ポテンシャル $V(r) = -(Ze^2/r)e^{-r/a}$ という簡単な形のポテンシャルで代表される 1 個の中性原子による 1 個の電子の弾性散乱への応用である．このポテンシャルは r が小さい場合には，原子番号を Z とした核の Coulomb ポテンシャルに似た性状を示すと共に，r がこの原子核を遮蔽している原子内電子雲の“半径” a に比べて大きくなれば急速に減少してゆく．原子に関する Thomas-Fermi の統計的理論 (§47) で明らかにされているように，中間の重さの原子に対しては m を電子質量として a は大体 $\hbar^2/me^2Z^{\frac{1}{3}}$ に等しくなる．このポテンシャルを (38.2) に代入すれば

$$f_B(\theta) = \frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 q}\int_0^\infty \sin qre^{-r/a}dr = \frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2(q^2+a^{-2})} \tag{38.3}$$

となる．この断面積 $|f_B(\theta)|^2$ は，やりとりされる運動量が十分大きくそのため分母で $1/a^2$ が q^2 に比べて無視できる場合には，(21.11) の Rutherford の結果と一致している．これと類似の古典論的な情況では，入射電子は原子核に対して十分接近して通過することになり，その結果原子内電子が核ポテンシャルを遮蔽する効果は比較的小さいことになる．

全断面積の値は，積分変数を θ から $q=2k\sin\frac{1}{2}\theta$ に変換してやれば最も容易に求められる．ただし，この場合には $\sin\theta d\theta$ は qdq/k^2 で置き換えられるから

$$\sigma = 2\pi\int_0^\pi |f_B(\theta)|^2\sin\theta d\theta = \frac{2\pi}{k^2}\int_0^{2k} q|f_B(q)|^2 dq = \frac{16\pi\mu^2Z^2e^4a^4}{\hbar^4(4k^2a^2+1)}$$

となる．先にあげた a に対する Thomas-Fermi の式を使い，さらに m と μ との相違を無視すれば，全断面積は高エネルギー（$ka\gg1$）では $4\pi Z^{\frac{4}{3}}/k^2$ になる．この結果は，Thomas-Fermi のポテンシャルによって生じる散乱についての数値積分の結果[1]と大きさのオーダーにおいて一致している．

38-2 Born 近似の妥当性

近似として §38.1 で考えられていたのは T 行列要素中の $\chi_\alpha{}^+$ を u_α で置き換えるという点だけである以上，(37.10) 中の $|v(\mathbf{r})|$ が $|\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r})|=1$ に比べて小さいことを要請することによって，Born 近似の妥当性に対する一つの便利な判定条件が求められる．$v(\mathbf{r})$ を評価するには摂動論を使わなければならないが，それには (37.12) を利用して，被積分関数中の $\chi_\alpha{}^+$ を u_α で置き換えればよい．その場合 $v(\mathbf{r})$ の評価を $r=0$ で行なうのが一番便利でもあり，また $v(\mathbf{r})$ が散乱ポテンシャルの中心で最大になっているということは十分根拠のあることである点からいってもこのことは望ましいはずである．このようにして得られる妥当性の判定条件は，おそらく十分条件にはなっているが，実際に要求される以上に強すぎるということはありうる；たとえば，小角度の散乱（小さな運動量のやりとり）が Born 近似によって正しく与えられるということが，大角度散乱がそうでないときにもありうることである．

ともかくこのようなやり方で $v(0)$ を求めてみると，

$$
\begin{aligned}
v(0) &\approx (\hbar C)^{-1}\int G^{+}_{0\omega_\alpha}(0,\mathbf{r})V(\mathbf{r})u_\alpha(\mathbf{r})d^3r \\
&= -\frac{\mu}{\hbar^2}\int_0^\infty\int_{-1}^1 e^{ikr}V(r)e^{ikrw}r\,dr\,dw \\
&= -\frac{\mu}{\hbar^2 k}\int_0^\infty (e^{2ikr}-1)V(r)dr \qquad (38.4)
\end{aligned}
$$

となる．ただし，w は $\mathbf{k}_\alpha$ と $\mathbf{r}$ との間の角の cos である．(38.4) に遮蔽された Coulomb ポテンシャルを代入してみると，$|v(0)|\ll1$ という条件は次のようになる．

$$
\frac{2\mu Ze^2}{\hbar^2 k}\left|\int_0^\infty \sin x\, e^{ix-x/ka}\frac{dx}{x}\right|\ll1
$$

ただしここの積分変数としては r を $x=kr$ で置き換えてある．$ka\ll1$ の場合にはこの条件は $2\mu Ze^2a/\hbar^2\ll1$ となるが，先にあげた a に対する近似式を使えばこれは $Z^{\frac{2}{3}}\ll1$

1) E. C. Bullard and H. S. Massey, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **26**, 556 (1930).

と同等になる.；つまり，Born 近似は遅い電子の原子による散乱には適用できないことになる．$ka \gg 1$ の場合には，先の判定条件は $(Ze^2/\hbar v)\ln ka \ll 1$ となり Z が余り大きくない限り速い電子に対してはこの近似は有用であるわけである．この最後の結果は相対性理論によっても実質的には影響されないということになる；つまり，v は c を超えることができずかつ $e^2/\hbar c=\frac{1}{137}$ である以上，重い元素に対しては Born 近似は怪しくなるわけである．

38-3 2個のポテンシャルからの散乱

散乱ポテンシャルを2個の部分の和として $V=V_1+V_2$ と書いておいてから，T 行列要素を片方たとえば V_1 だけから生じる部分と一つの補正項との和として書き表わしておくのが便利な場合が少なくない.[1] このような手つづきが便利になるのは，V_1 に対する波動方程式それ自体は正確に解くことができ，しかも V_2 はそれを1つの摂動と見なしうる程度に十分小さいという場合である．たとえば，V_1 は1個の電子と大きな Z をもつ1個の点的な核との間の Coulomb 相互作用で，V_2 は核が有限の大きさをもつために生じる付加的な静電相互作用であってよい．もう1つの例として，V_1 が短距離で強く作用する2個の陽子間の核相互作用であって，これに対しては少数の部分波だけを計算すれば事足りるもので，V_2 の方はそれよりもはるかに弱い Coulomb 相互作用であってもよい．

まず，(37.2)，(37.28)，(37.14)，(37.27) のそれぞれによって次の関係があることに注意しよう．

$$
\begin{aligned}
\langle\beta|T|\alpha\rangle &= (u_\beta, V\chi_\alpha{}^+) = (\chi_\beta{}^{T-}, Vu_\alpha) \\
\chi_\alpha{}^+ &= u_\alpha + (E-H_0+i\epsilon)^{-1}V\chi_\alpha{}^+ \\
\chi_\beta{}^{T-} &= u_\beta + (E-H_0-i\epsilon)^{-1}V^*\chi_\beta{}^{T-}
\end{aligned}
\tag{38.5}
$$

ただし，$E=E_\alpha=E_\beta$．ここで V_1 だけからの散乱を記述する方程式

$$\chi_{1\beta}{}^{T-} = u_\beta + (E-H_0-i\epsilon)^{-1}V_1{}^*\chi_{1\beta}{}^{T-}$$

を使って，$\langle\beta|T|\alpha\rangle$ に対する (38.5) の第一式中の u_β を書き換えてみる．その結果は次のようになる．

1) K. M. Watson, *Phys. Rev.* **88**, 1163 (1952); M. Gell-Mann and M. L. Goldberger, *Phys. Rev.* **91**, 398 (1953).

$$\begin{aligned}\langle\beta|T|\alpha\rangle &= [u_\beta, (V_1+V_2)\chi_\alpha{}^+] \\ &= [\chi_{1\beta}{}^{T-}, (V_1+V_2)\chi_\alpha{}^+] \\ &\quad -[(E-H_0-i\epsilon)^{-1}V_1{}^*\chi_{1\beta}{}^{T-}, (V_1+V_2)\chi^+] \\ &= [\chi_{1\beta}{}^{T-}, (V_1+V_2)\chi_\alpha{}^+] \\ &\quad -[\chi_{1\beta}{}^{T-}, V_1(E-H_0-i\epsilon)^{-1}(V_1+V_2)\chi_\alpha{}^+]\end{aligned}$$

ここでさらに，$(E-H_0+i\epsilon)^{-1}(V_1+V_2)\chi_\alpha{}^+$ は $\chi_\alpha{}^+-u_\alpha$ に等しく，$(\chi_{1\beta}{}^{T-}, V_1u_\alpha)$ は V_1 だけによる散乱を記述するT行列要素 $\langle\beta|T_1|\alpha\rangle$ に等しいことに注意して，結局次のようになる．

$$\langle\beta|T|\alpha\rangle=\langle\beta|T_1|\alpha\rangle+(\chi_{1\beta}{}^{T-}, V_2\chi_\alpha{}^+) \tag{38.6}$$

この関係は厳密になり立っているものである．

38-4　歪曲波を用いた Born 近似

(38.6) の方程式が最も使い易いのは V_2 が小さい場合である．この場合には，第二項は $\chi_\alpha{}^+$ を $\chi_{1\alpha}{}^+$ で置き換えれば V_2 について1次のオーダーまで求められる．この結果は**歪曲波 Born 近似** *distorted wave Born approximation* (DWBA)[1] でのT行列要素を与えるものである：

$$\langle\beta|T|\alpha\rangle\approx\langle\beta|T_1|\alpha\rangle+(\chi_{1\beta}{}^{T-}, V_2\chi_{1\alpha}{}^+) \tag{38.7}$$

(38.7) の形は補正項 $\langle\beta|(T-T_1)|\alpha\rangle$ が第一のポテンシャルによって歪みを与えられた状態の間での第二のポテンシャルの行列要素として与えられているという限りでは一応納得にゆくものである．しかしながら，この行列要素が二つの外向波のタイプの状態間ではなくて，漸近的には平面波プラス外向球面波になる始状態と漸近的には平面波プラス内向球面波になる終状態との間で計算されることになっているということは，一見奇妙に見えるかもしれない．この結果は次のようなふうに考えれば物理的には理解可能なものにすることができる．[2]

この計算のねらいは，V_2 が方向 $\mathbf{k}_\beta$ への散乱を引きおこしている遷移に対する

1) N. F. Mott and H. S. W. Massey, "The Theory of Atomic Collisions", p. 100 (Oxford, New York, 1933).

2) A. Sommerfeld, "Wellenmechanik" (Ungar, New York) あるいは "Atombau und Spektrallinien, vol. 2 (F. Vieweg & Sohn, Brunswick, Germany, 1939) の457頁の脚注；G. Breit and H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **93** 888 (1954).

確率を与えることにある．ところが，もしも終状態の波動関数が，外向波のタイプをもつものであることになっているとすれば，外向球面波中にはあらゆる方向が含まれている以上，この振幅の一部は $\mathbf{k}_\beta$ 以外の方向への散乱に結びついているものと考えられる．同様に考えれば，$\mathbf{k}_\beta$ の方向についての散乱の確率振幅の一部は，他の終状態に対する計算の中に含まれていることになる．なぜならば，これらの外向波には $\mathbf{k}_\beta$ 方向への散乱に対する寄与が含まれているはずであるからである．このような情況を避ける唯一のやり方は，終状態の波動関数をそれが外向波を含まないように選ぶことである：このことは終状態の波動関数が漸近的に平面波プラス内向波になる場合にのみ可能になるのである．

38-5 DWBA の部分波分析

もしも V_1 と V_2 とが球対称であるならば，歪曲波 Born 近似は V_1 だけに付随して生じる散乱の位相のずれ δ_l を使って書き表わすことができる．§19 および §37 の議論の簡単な拡張によって示されるように，$\chi_{1\alpha}{}^+(\mathbf{r})$ および $\chi_{1\beta}{}^{T-}(\mathbf{r})$ を次のように表わすことができる．

$$\chi_{1\alpha}{}^+(\mathbf{r})=C\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^lR_l(\mathbf{r})P_l(\cos\theta_\alpha)$$
$$\xrightarrow[r\to\infty]{} C\left[\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r})+\frac{1}{r}f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k}_\alpha)e^{ikr}\right]$$
$$\chi_{1\beta}{}^{T-}(\mathbf{r})=C\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^lR_l{}^*(r)P_l(\cos\theta_\beta)$$
$$\xrightarrow[r\to\infty]{} C\left[\exp(i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r})+\frac{1}{r}f^{T-}(\mathbf{k}_r,\mathbf{k}_\beta)e^{-ikr}\right] \qquad (38.8)$$
$$f(\mathbf{k}_r,\mathbf{k}_\alpha)=(2ik)^{-1}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1)P_l(\cos\theta_\alpha)$$
$$f^{T-}(\mathbf{k}_r,\mathbf{k}_\beta)=(2ik)^{-1}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(-1)^l(1-e^{-2i\delta_l{}^*})P_l(\cos\theta_\beta)$$
$$R_l(r)\xrightarrow[r\to\infty]{}\frac{e^{i\delta_l}}{kr}\sin(kr-\tfrac{1}{2}l\pi+\delta_l)$$

ただし，$k=k_\alpha=k_\beta$ で，θ_α は $\mathbf{r}$ と $\mathbf{k}_\alpha$ との間の角，θ_β は $\mathbf{r}$ と $\mathbf{k}_\beta$ との間の角である．任意の角 θ に対して $f(\theta)=f^{T-*}(\pi-\theta)$ という関係があるが，これは V が実の量であれば (37.24) の第二式と一致するものであることを注意しておく．

(38.8) の表式を (38.7) の第二項に代入すれば次のようになる．

$$(\chi_{1\beta}{}^{T-}, V_2\chi_{1\alpha}{}^{+})=4\pi|C|^2\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\int_0^{\infty}V_2(r)R_l{}^2(\mathbf{r})r^2dr \tag{38.9}$$

ただし θ は $\mathbf{k}_\beta$ と $\mathbf{k}_\alpha$ との間の角で，Legendre の多項式に対する加法定理（32.10）が用いられている．(38.9) の方程式は，V_1 が短距離の力であるため少数の δ_l だけが零と異なるといった場合にも l についての一つの無限級数になっているため，計算上の目的からは十分便利なものにはなっていない．この点を考慮して，各被積分関数の各々から $V_2(r)j_l{}^2(kr)$ をひきさって，それと見合う一つの級数の形で補塡しておくことが考えられる．δ_l が 0 であるならば $R_l(r)$ は $j_l(kr)$ に等しいのであるから，δ_l が零と異なる場合以外では $\int V_2(r)[R_l{}^2(r)-j_l{}^2(hr)]r^2dr$ は零に等しいわけである．そればかりでなく，この j_l を含む補塡のために付け加えるべき級数は，公式[1]

$$\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)j_l{}^2(kr)P_l(\cos\theta)=\frac{\sin qr}{qr} \qquad q=2k\sin\tfrac{1}{2}\theta \tag{38.10}$$

を利用すれば和をとることができて，その結果として V_2 のみに対する Born 近似が導かれることになる．

(37.21)，(38.2)，(38.7)，(38.9)，(38.10) を組み合せれば球対称散乱に対する歪曲波 Born 近似の振幅として次の結果が導かれる．[2]：

$$\begin{aligned} f_{\mathrm{DWBA}}(\theta)&=f_1(\theta)+f_{2B}(\theta)\\ &\quad-\frac{2\mu}{\hbar^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\int_0^{\infty}V_2(r)[R_l{}^2(r)-j_l{}^2(kr)]r^2dr \end{aligned} \tag{38.11}$$

ここで，f_1 は V_1 だけに対する正確な散乱振幅であり，f_{2B} は V_2 だけに対する Born 近似の振幅になっている．級数の部分は，V_2 によってひきおこされた 1 次の散乱に関して，V_1 のみによって平面波に生じた歪みの効果を表わしている．；ただしこの級数にあらわれる l の値はそれらに対して $\delta_l\neq 0$ であるようなものに限られる．注意すべきことは，(38.9) および (38.11) 中の積分は V_2 が r の大きな値に対して $1/r$ よりも早く減少する場合にのみ収斂すること，その意味で V_2 が遮蔽されていない Coulomb ポテンシャルの場合は特別の注意を払わねばならないということである．

---

1) G. N. Watson, "Theory of Bessel Functions" (Macmillan, New York, 1945) 第 2 版, p. 366.

2) L. I. Schiff, *Prog Thoret. Phys. Suppl. Extra Number* (1965), 400.

38-6 位相のずれに対する近似式

ここでポテンシャルが2個の部分にわけられていない場合に話をもどすことにする．Vが球対称であるとすれば

$$\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})=C\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l e^{i\delta_l}R_l(r)P_l(\cos\theta_\alpha)$$

$$u_\beta{}^+(\mathbf{r})=C\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l j_l(kr)P_l(\cos\theta_\beta)$$

という表式を（37.21）に代入してみることができる．ただし，θ_α は $\mathbf{r}$ と $\mathbf{k}_\alpha$ との間の角で，θ_β は $\mathbf{r}$ と $\mathbf{k}_\beta$ との間の角である．そうすれば，散乱振幅に対する正確な表式として次のものが得られる．

$$f(\theta)=-\frac{2\mu}{\hbar^2}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)P_l(\cos\theta)\int_0^\infty V(r)R_l(r)j_l(kr)r^2dr \tag{38.12}$$

（19.11）と（38.12）とを比較すればわかるように，位相のずれは次式で与えられることになる．

$$e^{i\delta_l}\sin\delta_l=-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)R_l(r)j_l(kr)r^2dr \tag{38.13}$$

Vについての一次のオーダーで正しい δ_l に対する近似式は，（38.13）の左辺の全体を δ_l で，右辺では被積分関数中の $R_l(r)$ を $j_l(kr)$ で置き換えることによって求められる．これは位相のずれに対する Born 近似に他ならない：

$$\delta_{Bl}=-\frac{2\mu k}{\hbar^2}\int_0^\infty V(r)j_l{}^2(kr)r^2dr \tag{38.14}$$

（38.14）が近似としてよくない程度に始めの少数の位相のずれが大きく，しかも残りの δ_l は小さいものの無視しえないといった場合も起こりうる．こうした場合には，（38.2），（38.10），（38.14）を使って（19.11）式を次のように書き直してみればよい．

$$f(\theta)\approx f_B(\theta)+\frac{1}{2ik}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)(e^{2i\delta_l}-1-2i\delta_{Bl})P_l(\cos\theta) \tag{38.15}$$

（38.15）の右辺の和における各項は，Vあるいは δ_l の一次のオーダーに関する限りでは零になり，その結果今のような場合には零にならないで，残るのは始めの方の少数の項に限られることになる．

38-7 内部自由度をもつ散乱体

ここではT行列の理論形式を，散乱体がいくつかの内部自由度をもっており，その結果散乱過程を通じて励起されることがありうるという場合に拡張することにする．たとえば，1個の電子が始めに基底状態にある1個の原子によって散乱されるとする；衝突後はその原子はやはり基底状態に止まっていること（弾性散乱）もあれば，あるいはある励起状態に残されること（非弾性散乱）もある．ただし，いずれの場合にしても，電子と原子との全エネルギーは保存されており，その意味では一つの定常的な情況を取り扱っていることになる．入射電子が原子内電子ととってかわるという可能性は考慮の外におく；この種の交換衝突については第10章において議論するつもりである．

全系のハミルトニアンを入射粒子と散乱体との相対運動の運動エネルギーと散乱体の内部運動とをまとめて記述する部分 H_0 と入射粒子と散乱体との間の相互作用を表現する部分 H' とにわける．たとえば，1個の電子（座標 $\mathbf{r}_1$）の1個の水素原子（原子内電子の座標 $\mathbf{r}_2$）による散乱においては，H_0 および H' はそれぞれ次のようになる．

$$H = H_0 + H'$$

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla_1{}^2 - \frac{\hbar^2}{2m}\nabla_2{}^2 - \frac{e^2}{r_2} \qquad H' = \frac{e^2}{r_{12}} - \frac{e^2}{r_1} \tag{38.16}$$

電子-原子系の換算質量 μ と電子質量 m とを区別することはこの場合には重要ではないが，原子核の衝突においては意味をもつことがありうる．

H_0 の固有関数は2個のパラメーターによって指定される．

$$H_0 u_{\alpha a} = E_{\alpha a} u_{\alpha a}$$

$$u_{\alpha a}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = C\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}_1)w_a(\mathbf{r}_2)$$

$$E_{\alpha a} \equiv \hbar\omega_{\alpha a} = \frac{\hbar^2 k_\alpha{}^2}{2\mu} + \epsilon_a \tag{38.17}$$

ただし，w_a および ϵ_a は散乱体のハミルトニアンのある代表的な固有関数および固有値である．これに対応するHの固有関数で外向波を含むものは次のような漸近形をもつ．

$$\chi_{\alpha a}{}^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \xrightarrow[r_1\to\infty]{} C\Big[\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}_1)w_a(\mathbf{r}_2) + \sum_b r_1{}^{-1}e^{ik_r r_1}f(\mathbf{k}_r, b\,;\,\mathbf{k}_\alpha, a)w_b(\mathbf{r}_2)\Big] \tag{38.18}$$

ここでの $\mathbf{k}_r$ は $\mathbf{r}_1$ の方向をその方向にもち，その大きさがエネルギー保存の関係 $(\hbar^2k_r{}^2/2\mu)+\epsilon_b = E_{\alpha a}$ によって与えられる一つのベクトルである．$b=a$ のときの振幅 f は弾性散乱を記述し，$b\neq a$ のときのそれは非弾性散乱を記述することになる．

38-8 弾性-および非弾性散乱の断面積

この波動関数 $\chi_{\alpha a}{}^+$ は(37.13)の形だけの一般化にすぎない次の Lippmann-Schwinger 方程式を満たしている．すなわち

$$\chi_{\alpha a}{}^+(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2') = u_{\alpha a}(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2') + \hbar^{-1}\iint G^+_{0\omega_{\alpha a}}(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' ; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{\alpha a}{}^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \tag{38.19}$$

H_0 に付属する伝搬関数は (37.8) の第2式を一般化し，さらに (37.19) を導き出してくる手順を利用することによって求めることができる：すなわち，

$$\begin{aligned}G^+_{0\omega_{\alpha a}}(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2' ; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \mathrm{S}_\beta \mathrm{S}_b (\omega_{\alpha a} - \omega_{\beta b} + i\epsilon)^{-1} u_{\beta b}(\mathbf{r}_1', \mathbf{r}_2') u_{\beta b}{}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &= \mathrm{S}_b w_b(\mathbf{r}_2') w_b{}^*(\mathbf{r}_2) \frac{\mu}{4\pi^3\hbar}\int (k_b{}^2 - k_\beta{}^2 + i\epsilon)^{-1} \exp[i\mathbf{k}_\beta\cdot(\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_1)] d^3k_\beta \\ &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar}\mathrm{S}_b w_b(\mathbf{r}_2') w_b{}^*(\mathbf{r}_2) |\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_1|^{-1} \exp(ik_b|\mathbf{r}_1' - \mathbf{r}_1|)\end{aligned} \tag{38.20}$$

$$k_b = +\left[k_a{}^2 + \frac{2\mu}{\hbar^2}(\epsilon_a - \epsilon_b)\right]^{\frac{1}{2}}$$

つまり，この k_β はエネルギーの保存からきまってくるものである．

ここで (37.21) を導いたやり方を今の情況に拡張することは容易な事柄である．(38.20) を (38.19) に代入して，その漸近形を (38.18) と比較すれば，次の関係に導かれる．

$$f(\mathbf{k}_r, b ; \mathbf{k}_\alpha, a) = -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2 C}\iint e^{-ik_b r_1 \cos\theta'} w_b{}^*(\mathbf{r}_2) H'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \times \chi_{\alpha a}{}^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2$$

ただし θ' は $\mathbf{k}_r$ または $\mathbf{r}_1'$ と $\mathbf{r}$ との間の角である．ここで大きさ k_b と $\mathbf{r}_1'$ の方向をもつベクトル $\mathbf{k}_\beta$ を定義してやれば，この関係は次のように書ける．

$$\begin{aligned}f(\mathbf{k}_\beta, b ; \mathbf{k}_\alpha, a) &= -\frac{\mu}{2\pi\hbar^2|C|^2}\langle\beta b|T|\alpha a\rangle \\ \langle\beta b|T|\alpha a\rangle &= \iint u_{\beta b}{}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) H'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\chi_{\alpha a}{}^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2\end{aligned} \tag{38.21}$$

(38.21) の方程式は明らかに (37.21) の一つの一般化になっている；さらにこれをいくつかの内部自由度をもつ散乱体に一般化することは容易にできる．

弾性散乱の微分断面積は §18 の場合のように $\chi_{\alpha a}{}^+$ の漸近形から求められて，$b=a$ としたときの振幅 f の大きさの2乗に等しくなる：すなわち

$$\sigma(\mathbf{k}_\beta, a\,;\,\mathbf{k}_\alpha, a) = |f(\mathbf{k}_\beta, a\,;\,\mathbf{k}_\alpha, a)|^2 \tag{38.22}$$

しかしながら，非弾性散乱の断面積を計算するに当っては，入射流束は最初の相対速度 $v_\alpha = \hbar k_\alpha/\mu$ に比例しているが，散乱流束の方は v_β に比例するという事実を考慮しておかねばならない．その結果，（37.5）を導いた際にあらわれたのと同じ乗数因子 v_β/v_α が得られる．結局，非弾性散乱の微分断面積は

$$\sigma(\mathbf{k}_\beta, b\,;\,\mathbf{k}_\alpha, a) = \frac{v_\beta}{v_\alpha}|f(\mathbf{k}_\beta, b\,;\,\mathbf{k}_\alpha, a)|^2 \tag{38.23}$$

となる．

38-9　電子の水素による散乱

（38.22）と（38.23）の方程式は，§43 で論じられる入射電子と原子の電子との間の入れ替え（交換）を無視しているという点を除けば，電子-原子散乱の一つの正確な記述を与えているものである．（38.21）の T 行列要素中の $\chi_{\alpha a}{}^+$ を $u_{\alpha a}$ で置き換えてやれば，前と同様に Born 近似が求められる．その結果あらわれる積分の値を求めることは，水素の場合には難しいことではない．

（38.16）および（38.17）の両方程式から Born 近似での行列要素として次のものが得られる．

$$\iint u_{\beta b}{}^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)H'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)u_{\alpha a}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2$$
$$= |C|^2e^2\iint \exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1)\left(\frac{1}{\mathbf{r}_{12}} - \frac{1}{r_1}\right)w_b{}^*(\mathbf{r}_2)w_a(\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2 \tag{38.24}$$

計算としては，最初に r_1 についての積分を求めた上で，その上で $1/r_{12}$ と $1/r_1$ の各部分を別々に積分してゆくのが便利である．ただし，これらの各部分の積分はそれぞれ各個には厳密には収斂しないことを考慮しておかねばならない．というのは（38.24）の被積分関数の第二の部分については

$$\int \frac{\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1)}{r_1}d^3r_1 = \frac{4\pi}{q}\int_0^\infty \sin qr_1dr_1 \tag{38.25}$$

となり，第一の部分も大きな r_1 の値（すなわち $r_1 \gg r_2$）に対しては同様な振舞いを示すからである．2 個の部分が r_1 の大きな値に対して同様な振舞いを示すため，両者の差をとったものは $1/r_1$ のようにでなくむしろ $1/r_1{}^2$ のように減少してゆく，その結果

両者を一諸にして考えれば（38.25）の被積分関数の分母に r_1 の1以上のベキが結局残ることになり積分が収斂するのである．この点を考えてしかも2個の部分を別々に積分することの便利さを残そうとするには，（38.24）の被積分関数に積分を収斂させるための一つの因子 $e^{-\alpha r_1}$ を導入しておいて，後で $\alpha\to 0$ の極限をとることにすればよい：すなわち

$$\int\frac{\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{k}_1)}{r_1}d^3r_1=\lim_{\alpha\to 0}\frac{4\pi}{q}\int_0^\infty \sin qr_1 e^{-\alpha r_1}dr_1=\frac{4\pi}{q^2} \tag{38.26}$$

この便法を使うことにすれば，（38.24）の r_1 についての積分の中で $1/r_{12}$ の部分は次のように書き直して求めることができる．すなわち

$$\int\frac{\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1)}{r_{12}}d^3r_1=\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2)\int\frac{\exp(i\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho})}{\rho}d^3\rho$$
$$=\frac{4\pi}{q^2}\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2)$$

ただし，$\boldsymbol{\rho}=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2$ とおいて，（38.26）を使ってある．このようにして，Born 行列要素（38.24）は

$$\frac{4\pi|C|^2e^2}{q^2}\int[\exp(i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2)-1]w_b{}^*(\mathbf{r}_2)w_a(\mathbf{r}_2)d^3r_2 \tag{38.27}$$

となる．関数 w は（16.24）で与えられている水素原子波動関数で，その構造は至極簡単なものであるため，r_2 についての積分は初等的にできる．

基底状態からの弾性散乱に対しては Born 振幅は次のようになる．

$$f_B(\theta)=-\frac{2\mu e^2}{\hbar^2q^2}[(1+\tfrac{1}{4}q^2a_0{}^2)^{-2}-1]$$
$$q=2k_\alpha\sin\tfrac{1}{2}\theta \qquad k_\beta=k_\alpha \tag{38.28}$$

（38.3）と（38.28）とを比較してみればわかるように，この節の冒頭で利用した遮蔽 Coulomb ポテンシャルは，比較的重い原子に対してはそうでもないにしても，水素原子に対しては十分良いモデルにはなっていないのである．

同様な結果は非弾性散乱に対しても一応求めることはできる．1S の基底状態（$n=1$，$l=m=0$）から 2S の最初の励起状態（$n=2$，$l=m=0$）への遷移に対しては，（38.27）の被積分関数中の第二項は，始めと終りの原子波動関数の直交性によって零になり，振幅としては次のものが得られる．

$$f_B(\theta)=-\frac{8\sqrt{2}\,\mu a_0{}^2e^2}{\hbar^2}(q^2a_0{}^2+\tfrac{9}{4})^{-3}$$

$$q^2=k_\alpha{}^2+k_\beta{}^2-2k_\alpha k_\beta\cos\theta \qquad k_\beta{}^2=k_\alpha{}^2-\frac{3}{4a_0{}^2} \qquad (38.29)$$

高エネルギーの場合は，Born 近似には最も都合がよいわけであるが，$k_\alpha a_0$ は1に比べて大きく，k_β は殆ど k_α に等しく，q は近似的に $2k_\alpha\sin\frac{1}{2}\theta$ に等しくなる．この場合には，(38.29) からわかるように，大部分の散乱は $qa_0\leq 1$ の範囲で起こっており，角度にすればそれは $\theta\leq 1/k_0a_0$ という領域と同等である．この領域の外では微分断面積は角度が増すと共に近似的に $\mathrm{cosec}^{12}\frac{1}{2}\theta$ の形で減少してゆく．この角変化は (38.27)から弾性散乱に対して得られる角変化 $\mathrm{cosec}^4\frac{1}{2}\theta$ に比べて角度と共にはるかに急速に減少するものである．このような相違の生じる原因は，弾性散乱に効くのは原子核であり，一方始めと終りの波動関数の直交性が意味するように非弾性散乱に効くのははるかに稀薄な電子雲に限られるという点にある．

全断面積を求めるには，θ についてよりも q について積分することによるのが容易である．この q についての積分は (38.29) の第二式を利用して $\sin\theta d\theta$ を $qdq/k_\alpha k_\beta$ で置き換えて行なえばよい．高エネルギーの場合での弾性散乱に対する結果は $7\pi/3k_\alpha{}^2$ となるが，それは $1S\rightarrow 2S$ の遷移による全断面積 $(\frac{2}{3})^{10}(128\pi/5k_\alpha{}^2)$ の約5倍になる．$n=2$, $l=1$ をもつ状態への励起 ($1S-2P$ 遷移) は3個の終状態 ($m=0$, ±1) をその極軸が移される運動量ベクトル $\mathbf{q}$ の方向にそろうように選ぶことにすれば最も容易に計算される．この場合，$m=\pm1$ に対応する波動関数にあらわれる因子 $e^{\pm i\phi}$ によってこの種の状態に関する行列要素は零になり，$m=0$ をもつ状態だけが励起されることになる．このことは物理的には，入射電子でその運動量損失が $\mathbf{q}$ の方向と一致するものは原子内電子に対し，この軸の周りの回転力を作用し得ないことに対応している．高エネルギーでのこの過程に対する全断面積は $(\frac{2}{3})^{12}(576\pi/k_\alpha{}^2)\ln 4k_\alpha a_0$ になる．対数の項が現われることは，微分断面積中の $1/q^2$ という余分の項に由来するものである．要するに，$1S\rightarrow 2S$ 散乱と比較して $1S\rightarrow 2P$ 散乱の微分断面積は小さな角度により集中することになり，散乱の全面積としては高エネルギーでのエネルギーの増大に伴う減少の仕方はよりゆるやかになる．

38-10　霧箱の飛跡の形成

高速電子については，ある確定的な運動量（大きさおよび方向）をもつものと考えてお

くことができ，したがって空間的にそれを局所化できないものであるのに，それが霧箱の中で鮮明な飛跡をつくり出しうるということは，一寸考えると驚くべきことであるように思われる．この現象は種々の観点から考察することができる．Ehrenfest の定理（§7）に従って，この電子をその重心が1個の古典的粒子のように運動する一つの波束によって表わすことができる．波長が十分短かければ，この波束は急速に拡散してゆくことなしに十分小さなものでありうるわけで，その結果その中心の径路の近傍にある原子とのみ相互作用することになる．このことは，この電子が平面波の一つの重ね合せによって表わされており，したがってその位置を十分よく定義することのできるような運動量についての不確定性をもっていることを意味している．

もう一つの考え方はこの電子を単一の平面波によって記述し，電子が励起または電離する最初の原子とのその相互作用を原子の大きさ程度の不確定さを伴う一つの位置測定とみなすことにある．このような考え方によれば，この最初の原子が電子の波長に比べて大きいものであれば（$ka\gg1$），測定後ではその電子は前のパラグラフで述べたような，十分局所化された一つの波束によって表わされることになる．

ここでは，さらに，第三の記述を詳しく考察することにする．この記述では電子と霧箱の原子とは単一の系の部分として扱われる，つまり原子との相互作用を電子の波動関数の構造を変えてしまう1つの位置測定と見なすことはしないわけである．事情を簡単化するために基底状態にある2個の原子だけが存在し，それらの原子核は互いに十分離れておりかつ空間に固定されているものと仮定する．そこで次に両方の原子が励起されかつ電子が非弾性的に散乱される過程に対する断面積を計算する．1個の高速の入射電子に対しては摂動論を用いることができる；ただし，電子は2個の原子と別々に相互作用するのであるから，この過程は一次のオーダーの摂動論では起こらず二次のオーダーまで進めることが必要になる．この計算は得られる結果という点，またそれが二次の摂動論についての一つの教訓的な実例になるという点のいずれからしても興味があるものである．[1]

計算の結果は次のようになる．入射電子の運動量ベクトルが2個の原子核を結ぶ直線と殆ど方向がそろっていないかぎり，さらにまた電子の始めと終りの運動量が平行

1) W. Heisenberg, "The Physical Principles of the Quantum Theory" (University of Chicago Press, 1930) の p. 66—76.

に近くなっていない限り，断面積は小さい．これらの三つの方向は，ラヂアンで表わせば電子の波長と原子の大きさの比の程度の大きさの角度の拡がりをもちうる．このことは §38.8 で高速電子と水素原子との非弾性散乱に対して得られた結果，すなわち散乱された電子の角度のひろがりが大体 $1/k_\alpha a_0$ の程度になるということから類推されることである．それはまた同じ過程の波束による記述とも一致している．というのは，電子をその運動量に対して直角の方向に原子1個の大きさ程度に局在化させることは，運動量の構成分に $\hbar/a$ 程度の大きさの不確定性をもちこみ，その結果 $\hbar/ap\approx 1/ka$ 程度の角度の拡がりを生じることになるからである．

38-11　二次の摂動論

一次の摂動近似すなわち T 行列要素（38.21）に対する Born 近似は $\chi_{\alpha a}{}^+$ を $u_{\alpha a}$ で置き換えることによって得られた．同様なやり方で，二次の近似を求めるには，$\chi_{\alpha a}{}^+$ を（37.15）に対応するこの場合の摂動級数の第2項で置き換えればよく，その結果は次のようになる．

$$\frac{1}{\hbar}\iiiint u_{\beta b}{}^*(\mathbf{r}_1{}', \mathbf{r}_2{}')H'(\mathbf{r}_1{}', \mathbf{r}_2{}')G^+_{0\omega_{\alpha a}}(\mathbf{r}_1{}', \mathbf{r}_2{}'; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)H'(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ u_{\alpha a}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)d^3r_1{}'d^3r_2{}'d^3r_1d^3r_2$$

伝播関数の部分の書き換えは（38.20）の第1行について行なったのと同様にやればよい．ただし，この場合の和は β および b についてではなく γ および c についてになる．結局 T 行列要素に対する二次のオーダーの寄与として次の表式が得られる．[1)]

$$\mathsf{S}_\gamma\mathsf{S}_c(E_{\alpha a}-E_{\gamma c}-i\epsilon)^{-1}\langle\beta b|H'|\gamma c\rangle\langle\gamma c|H'|\alpha a\rangle \qquad (38.30)$$

この表式は二段の一つの過程を記述しているものと考えることができる．つまり系は摂動 H' の影響の下に始状態 αa からすべての可能な中間状態 γc への遷移を行ない，ついでこれらの γc から終状態 βb へ同様な遷移を行なうわけである．始めと終りの状態との間ではエネルギーは保存されるが，中間状態に関してはその必要はない．これらの中間状態は過渡的に存在するものにすぎず，不確定性原理（3.3）によればこのような寿命の短い状態のエネルギーを何らかの精度で決定することは不可能なのである．

1)　この種の表式は E. Fermi によって“第一の黄金法則 (Golden Rule No. 1)”とよばれたものである．“Nuclear Physics” (University of Chicago Press, Chicago, 1950), p. 148.

その意味で，二次のT行列要素に対するこの種の状態の寄与が始状態からのエネルギー上のずれに逆比例しているということは驚くにあたらないわけである．また同様な二次の行列要素は離散的エネルギー準位の接動に関連して（31.20）にすでに現われていた．

（38.30）をここで問題にしている情況に適用できるようにするには，それに先立って基礎になっている記法を一般化しておかねばならない．電子と2個の十分離れた原子に対するハミルトニアンは次のようになる．

$$H=H_0+H'$$

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+H_1(1)+H_2(2)$$

$$H'(\mathbf{r},1,2)=H_1'(\mathbf{r},1)+H_2'(\mathbf{r},2)$$

ここで$\mathbf{r}$は電子の座標，H_1は第一の原子それ自体に対するハミルトニアンで1はこの原子のすべての内部座標を表わしている．またH_1'は電子と第1の原子との間の相互作用である；第二の原子も同様なふうに記述されている．この場合（38.30）の表式は次のように書くことができる．

$$\mathsf{S}_\gamma \mathsf{S}_{c_1} \mathsf{S}_{c_2} (E_{\alpha a_1 a_2}-E_{\gamma c_1 c_2}+i\epsilon)^{-1}\langle\beta b_1 b_2|H'|\gamma c_1 c_2\rangle\langle\gamma c_1 c_2|H'|\alpha a_1 a_2\rangle$$

中間状態$\gamma c_1 c_2$については2個の可能なグループがあることは明らかである．：一つはH'の影響の下で第一の原子が状態a_1から状態b_1へ遷移しており（$c_1=b_1$）ただし第二の原子はその状態を変化していない（$c_2=a_2$）グループで，今一つは$c_1=a_1$であるが，ただし第二の原子がH_2'の影響をうけてa_2からb_2へ状態を変化している（$c_2=b_2$）グループである．つまり二次の行列要素は次のように書くことができるわけである．

$$\begin{aligned}&\mathsf{S}_\gamma (E_{\alpha a_1}-E_{\gamma b_1}+i\epsilon)^{-1}\langle\beta b_2|H_2'|\gamma a_2\rangle\langle\gamma b_1|H_1'|\alpha a_1\rangle\\&\quad+\mathsf{S}_\gamma (E_{\alpha a_2}-E_{\gamma b_2}+i\epsilon)^{-1}\langle\beta b_1|H_1'|\gamma a_1\rangle\langle\gamma b_2|H_2'|\alpha a_2\rangle\end{aligned} \tag{38.31}$$

38-12 二次の行列要素の評価

ここではまず（38.31）での最初の和の評価を具体的に行ない，その後で第二の和を求めるためにその結果をどのように変形しなければならないかを示すことにする．最初の和に際してあらわれる因子は（38.24）および（38.20）との類推から次のような形に書くことができる：

$$\langle\gamma b_1|H_1'|\alpha a_1\rangle=|C|^2\iint\exp(-i\mathbf{k}_\gamma\cdot\mathbf{r}+i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r})$$

$$\times H_1'(\mathbf{r},1)w_{b_1}^*(1)w_{a_1}(1)d^3r d\tau_1$$

$$\langle\beta b_2|H_2'|\gamma a_2\rangle = |C|^2\iint \exp(-i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r}'+i\mathbf{k}_\gamma\cdot\mathbf{r}') \tag{38.32}$$

$$\times H_2'(\mathbf{r}',2)w_{b_2}^*(2)w_{a_2}(2)d^3r'd\tau_2$$

$$E_{\alpha a_1}-E_{\gamma b_1}+i\epsilon=\frac{\hbar^2}{2m}(\kappa^2-k_\gamma{}^2+i\epsilon)$$

$$\kappa^2\equiv k_\alpha{}^2-\frac{2m}{\hbar^2}(\epsilon_{b_1}-\epsilon_{a_1})$$

ところで，この γ についての和は（37.18）を導いたのと類似のやり方で実行することができて，その結果は次のようになる．

$$-\frac{m|C|^2}{2\pi\hbar^2}\iint|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^{-1}\exp(i\kappa|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|-i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r}'+i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r})d^3r'd^3r$$

$$\times\int w_{b_2}^*(2)H_2'(\mathbf{r}',2)w_{a_2}(2)d\tau_2\int w_{b_1}^*(1)H_1'(\mathbf{r},1)w_{a_1}(1)d\tau_1 \tag{38.33}$$

一般性を失わずに，第一の原子の原子核は座標の原点に位置し，第二の原子のそれは点 $\mathbf{R}$ に位置しているとすることができる．その場合，第一の原子の内部座標についての積分は $\mathbf{r}$ が零に近くない限り極めて小さく，第二の原子に対するそれに対応する積分も $\mathbf{r}'$ が $\mathbf{R}$ に近くない限り極めて小さくなるはずである．したがって

$$F_1(\mathbf{r})\equiv\int w_{b_1}^*(1)H_1'(\mathbf{r},1)w_{a_1}(1)d\tau_1$$

$$F_2(\mathbf{r}'-\mathbf{R})\equiv\int w_{b_2}^*(2)H_2'(\mathbf{r}',2)w_{a_2}(2)d\tau_2$$

と書くことにすると，これらの F はそれらの引数の零からのずれが原子の大きさ程度の距離までになっている場合を除いては極めて小さいわけである．そこで $\mathbf{r}''\equiv\mathbf{r}'-\mathbf{R}$ とおくと，（38.33）に対する寄与は実際上すべて $\mathbf{r}$ および $\mathbf{r}''$ の小さな値から生じるということになる．そこで

$$|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|=|\mathbf{R}+\mathbf{r}''-\mathbf{r}|\approx R+\frac{\mathbf{R}\cdot\mathbf{r}''}{R}-\frac{\mathbf{R}\cdot\mathbf{r}}{R}\qquad |\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^{-1}\approx R^{-1}$$

という近似を使って，R の大きな値に対する（38.33）の主要項を求めることができる．それには大きさが κ で $\mathbf{R}$ の方向をもつベクトル $\boldsymbol{\kappa}$ を定義するのが便利である．そうすれば上の近似式を（38.33）に代入した結果は次のように書けることになる．

$$-\frac{m|C|^2}{2\pi\hbar^2}\frac{1}{R}\exp[i(\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{k}_\beta)\cdot\mathbf{R}]\int F_2(\mathbf{r}'')\exp[i(\boldsymbol{\kappa}-\mathbf{k}_\beta)\cdot\mathbf{r}'']d^3r''$$
$$\times\int F_1(\mathbf{r})\exp[i(\mathbf{k}_\alpha-\boldsymbol{\kappa})\cdot\mathbf{r}]d^3r \qquad (38.34)$$

同じようなやり方で，(38.31) の第二の和は次のようになる.

$$-\frac{m|C|^2}{2\pi\hbar^2}\frac{1}{R}\exp[i(\boldsymbol{\kappa}'+\mathbf{k}_\alpha)\cdot\mathbf{R}]\int F_2(\mathbf{r}'')\exp[-i(\boldsymbol{\kappa}'+\mathbf{k}_\beta)\cdot\mathbf{r}'']d^3r''$$
$$\times\int F_1(\mathbf{r})\exp[i(\mathbf{k}_\alpha+\boldsymbol{\kappa}')\cdot\mathbf{r}]d^3r \qquad (38.35)$$

ただし $\boldsymbol{\kappa}'$ はその大きさが (38.32) の最後の式で $\epsilon_{b_1}-\epsilon_{a_1}$ を $\epsilon_{b_2}-\epsilon_{a_2}$ で置き換えたもので与えられかつ$\mathbf{R}$の方向をもつベクトルである.

散乱振幅 (38.21) 中のT行列要素のところに (38.34) と (38.35) の和を代入して，その結果を (38.23) に代入すれば散乱の微分断面積が求められる. エネルギーの保存からは $k_\beta^2=k_\alpha^2-(2m/\hbar^2)(\epsilon_{b_1}+\epsilon_{b_2}-\epsilon_{a_1}-\epsilon_{a_2})$ であることが要求される.

38-13 断面積についての議論

(38.34) と (38.35) にあらわれている積分は衝突問題の摂動論的な取扱いに付随している特有な構造を示している. つまり，それらは被積分関数の指数因子にあらわれる伝播ベクトルが $1/a$ 程度またはそれ以下の大きさをもつ場合でなければ極めて小さい. ただしaは (Fがはっきり零と異なった値をとる) 原子としての典型的な一次元的拡がりである. その結果，ベクトル $\mathbf{k}_\alpha, \boldsymbol{\kappa}$ および $\mathbf{k}_\beta$ が大きさおよび方向について殆ど等しい場合に限ってのみ (38.34) が問題になるという結論になる. 入射電子が高速であるという仮定があるため，これらのベクトルの大きさはいかなる事象においても殆ど間違いなく等しくなる.；さらに，$\boldsymbol{\kappa}$の方向は$\mathbf{R}$の方向と同一になっている. したがって (38.34) から導かれる断面積はベクトル$\mathbf{R}$および $\mathbf{k}_\beta$ が $\mathbf{k}_\alpha$ と殆ど平行になっている場合にのみある程度の大きさをもつことになる. この平行関係からの角度のずれとして許されるのは，$1/k_\alpha a$ 程度のものになることは容易に示される.

同様に，$\boldsymbol{\kappa}'$ したがってまた$\mathbf{R}$が $\mathbf{k}_\alpha$ および $\mathbf{k}_\beta$ と殆ど反平行になっている場合に限って (38.35) が問題になるという結論になる. この場合最後の二つのベルトル $\mathbf{k}_\alpha$ および $\mathbf{k}_\beta$ はお互いに殆ど平行になっている.

この二つの項を一緒にしてみればわかるように，両方の原子を励起するというこ

とは，２個の原子を結ぶ直線が入射電子の方向に対し殆ど平行になっている場合にのみある程度の確率で起こることになる．しかしながら，座標系の原点の選び方が任意であるからには，原子空間のどこに位置しているかについてはこれ以上制限はない．したがって，たとえ霧箱の飛跡が空間内であるはっきり定義された向きをもつものであるにしても，入射電子が一つの平面波で記述されるならば飛跡はどのようなところにでもあらわれてよいことになる．なお，予想されるように，この断面積は２個の原子の間の距離 R の２乗に逆比例して減少することも明らかである．

38-14 アイコナル近似

この節の始めの方で説明した摂動の方法とは（37.2）の T 行列要素中の $\chi_\alpha{}^+$ を（37.15）の右辺の最初の１個または２個の項で置き換えるというものである．$\chi_\alpha{}^+$ に対する全く異なった近似を §34 で議論した WKB 近似の考え方によっても求めることができる：この種の近似を（37.2）に代入すると**アイコナル近似** *eikonal approximation*[1] が得られる．

WKB 近似とは正確な方程式から出発して，一次元の場合では波動関数の対数である $S(\mathbf{r})$ を $\hbar$ のベキに展開するというものである．先頭の項 S_0 は波動関数の位相を近似し，次の項 S_1 はその大きさを近似している．この近似法の大ざっぱな判定条件は（34.9）に求められている；三次元の場合にはこの条件は次の要請に対応している．

$$\left|\frac{\nabla k}{k^2}\right| \ll 1 \qquad k(\mathbf{r}) \equiv +\frac{1}{\hbar}\{2\mu[E_\alpha - V(\mathbf{r})]\}^{\frac{1}{2}}$$

物理的にこのことはポテンシャル・エネルギーが極めてゆっくり変化しており，その結果多数の波数を含む範囲にわたって局所的な運動量 $\hbar k(\mathbf{r})$ が実質的に一定になっていることを意味する．

ここでの応用のためには，さらにその上に S_0 に比較して S_1 を無視しうること，および $V(\mathbf{r})$ はいたるところで E_α に比べて小さいことを仮定しよう．つまり $V(\mathbf{r})$ が急速に変化することのない一つの高エネルギー近似になるわけである．したがって一寸考えると，最終的な結果は Born 近似と同等になると考えられるかもしれない．しか

1) G. Molière, *Z. Naturforsch.* **2**, 133 (1947). 光学および古典力学と結びついたこの種の考え方の前史についての概説は，M. Born and E. Wolf, "Principles of Optics" (Pergamon Press, New York, 1959) の p. 111, 132 にある．

しながら，(38.4) から明らかなように，高エネルギーにおいては Born 近似が正当であるためには，$\left|(\hbar v_\alpha)^{-1}\int_0^\infty V(r)dr\right|$ が1に比べて小さくなければならない．このパラメーターはたとえ $V\ll E_\alpha$ であっても作用距離の長い弱いポテンシャルに対しては1よりも大きくなりうる；アイコナル近似はこのパラメーターの値を制限しておらず，その意味で Born 近似よりも優れているのである．

要するにまず

$$\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})\approx C\exp\frac{iS_0(\mathbf{r})}{\hbar}\qquad(\nabla S_0)^2=2\mu[E_\alpha-V(\mathbf{r})]=\hbar^2k^2(\mathbf{r})\quad(38.36)$$

とおく．この S_0 に対する微分方程式のVを無視したときの解は $S_0(\mathbf{r})=\hbar\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}$ である．ただし，$\mathbf{k}_\alpha$ は大きさ $k_\alpha=(2\mu E_\alpha/\hbar^2)^{\frac{1}{2}}$ をもつ任意のベクトルである．この場合には $\chi_\alpha{}^+$ は予想される通りに u_α に他ならないことになり，Born 近似が得られる．V が無視しうる場合には $S_0(\mathbf{r})=\hbar k_\alpha z$ となるように，正の z 軸を $\mathbf{k}_\alpha$ の方向にそろえて選んでおくのが便利である．

Vが有限ではあるが E_α に比べて小さいという場合に，(38.36) の次のような近似解を試してみよう．：

$$S_0(\mathbf{r})\approx\hbar k_\alpha z-\frac{1}{v_\alpha}\int_{z_0}^{z}V(x,y,z')dz'\qquad(38.37)$$

ただし $v_\alpha=\hbar k_\alpha/\mu$ は相対速度で z_0 はすぐ後で決定されるはずの一つの定数である．；なお，積分はすべての $\mathbf{r}$ および z_0 に対して収斂するものと仮定されている．(38.37) を (38.36) の第2式に代入してみればわかるように，$\mu V^2/E_\alpha$ のオーダーの項を除けばこの方程式は満たされており；この種の項は $V\ll E_\alpha$ である以上 $2\mu V$ に比べて無視することが許される．したがって次のようになる．

$$\chi_\alpha{}^+(\mathbf{r})\approx C\exp\left\{i\left[k_\alpha z-\frac{1}{\hbar v_\alpha}\int_{z_0}^{z}V(x,y,z')dz'\right]\right\}.\qquad(38.38)$$

先に導入しておいた近似の限界内では，(38.38) は波動方程式の一つの解にはなっているが，それは必ずしも外向波のタイプのものにはなっていない．そこで z_0 を $\mp\infty$ になるように選べばそれに応じて $\chi_\alpha{}^\pm$ が得られることを証明しよう．このことを示すには，まず (38.38) を次のように平面波プラス散乱波の形に書いてみる：

$$u_\alpha(\mathbf{r})+Ce^{ik_\alpha z}\left\{\exp\left[-\frac{i}{\hbar v_\alpha}\int_{z_0}^{z}V(x,y,z')dz'\right]-1\right\}$$

この散乱波の部分は直径がポテンシャル場の直径で，かつ z 軸をその中心軸にするよう

な一つの管(チューブ)の外側では零である．z_0 を $-\infty$ に選ぶとこの漸近的な散乱波は管の z が負の管の半分の部分でも零になり，z が正の残りの半分では $e^{ik_\alpha z}$ の定数倍，つまりそれは一つの外向きの波になる．同様に $z_0=+\infty$ に選べば，この漸近的な散乱波は z が正の管の半分では零，z が負の半分では一つの内向きに波になる．

先に注意しておいたように，アイコナル近似は高エネルギーでの最低オーダーで χ_α^+ と u_α との図の位相のずれを考慮に入れているという点では Born 近似よりも優れている．このことからわかるように，この位相のずれが1に比べて小さい限り，すなわちすべての $\mathbf{r}$ に対して

$$\left[(\hbar v_\alpha)^{-1}\int_{-\infty}^{z} V(x,y,z')dz'\right]\ll 1 \tag{38.39}$$

の場合のみ Born 近似が高エネルギーにおいて妥当するのである．この妥当性の判定条件は，$V(\mathbf{r})$ が球対称でない場合にも適用できるという意味で (38.4) から推論された条件より一般的なものになっている．この χ_α^+ を u_α の代りに用いるということは，その粒子がポテンシャル中を運動する際の速度の方向についての変化を無視すること，および波動関数の振幅についてではなくその位相について影響があるという限りでの速度の大きさにおける変化の効果はこれを取り入れるということに対応しているのである．

38-15　散乱振幅と断面積

(38.38) を (37.20) に代入すれば散乱振幅に対して次式が得られる．

$$f(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)\approx-\frac{\mu}{2\pi\hbar^2}\int V(\mathbf{r})\exp\left\{i\left[\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}-\frac{1}{\hbar v_\alpha}\int_{-\infty}^{z}V(x,y,z')dz'\right]\right\}d^3r$$

この表式が正しいのは散乱角 θ が $(k_\alpha a)^{-\frac{1}{2}}$ に比べて小さい場合に限られることを証明することができる．[1] ただし，a はポテンシャルの作用距離である．この範囲の θ に対しては $\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}$ を q_xx+q_yy で置き換えることができる．；これは q_xx と q_yy とは $\lesssim k_\alpha a\theta$ であって1に比べてずっと大きいことがありうるが，一方 q_zz は $\lesssim k_\alpha a\theta^2$ であって1

---

1) L. I. Schiff, *Phys. Rev.* **103**, 443 (1956). より大きな角に対して成立する散乱振幅の同様な表式がこの論文で導かれており，より広汎な議論は D. S. Saxon, L. I. Schiff, *Nuovo Cimento* **6**, 614 (1957) でされている．散乱角が小さな場合についての詳しい綜合報告および付加的な種々の結果の導出については，W. E. Brittin, L. G. Dunham 共編 "Lectures in Theoretical Physics" (Interscience, New York, 1959) vol. 1, p. 315 の R. J. Glauber の論文を見られたい．

に比べてはるかに小さいということによるものである．この置き換えをすれば z についての積分は実行することができて，次の結果が導かれることになる．

$$f(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\alpha) \approx \frac{ik_\alpha}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(q_x x + q_y y)} \left\{1 - \exp\left[-\frac{i}{\hbar v_\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} V(x, y, z) dz\right]\right\} dx\, dy \tag{38.40}$$

全断面積は (20.23) の光学定理を利用して (38.40) から求めることができる．

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{tot}} &= \frac{4\pi}{k_\alpha} \mathrm{Im}\,[f(\mathbf{k}_\alpha, \mathbf{k}_\alpha)] \\ &\approx 2 \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{1 - \exp\left[-\frac{1}{\hbar v_\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} V_I(x, y, z) dz\right] \right. \\ &\qquad \left. \times \cos\left[\frac{1}{\hbar v_\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} V_R(x, y, z) dz\right]\right\} dx\, dy\end{aligned} \tag{38.41}$$

§20 におけると同様，ここでも V_R を実の量，V_I を正の実の量として $V = V_R - iV_I$ ととってある．

全断面積に対するこの表式が，弾性散乱の全断面積 σ_{el}，吸収と非弾性散乱の断面積の和 σ_{abs} のそれぞれについての適当な評価の結果と矛盾がないかどうかを調べてみることは興味がある．たとえ大きな角度に対しては (38.40) は成立しないにしても，振幅はそこでは極めて小さくなっており σ_{el} に対する寄与の大部分は小さな角度から生じるものと推定することは十分根拠があることである．そうだとすれば $q_x \approx k_\alpha \theta \cos\phi$，$q_y \approx k_\alpha \theta \sin\phi$ とおくことができ，立体角要素も $\sin\theta d\theta d\phi \approx \theta d\theta d\phi \approx dq_x dq_y / k_\alpha^2$ と書き直すことができる．さらにまた，もっぱら事情を簡単にするため，q_x および q_y についての積分の限界も $\pm\infty$ にまで延長して近似することにする．そうすれば結局次の結果が得られる．

$$\begin{aligned}\sigma_{\text{el}} &\approx \frac{1}{k_\alpha^2} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} |f(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\alpha)|^2 dq_x dq_y \\ &\approx \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \left\{1 - 2\exp\left[-\frac{1}{\hbar v_\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} V_I(x, y, z) dz\right] \right. \\ &\qquad \times \cos\left[\frac{1}{\hbar v_\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} V_R(x, y, z) dz\right] \\ &\qquad \left. + \exp\left[-\frac{2}{\hbar v_\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} V_I(x, y, z) dz\right]\right\} dx\, dy\end{aligned} \tag{38.42}$$

ただしここでは (11.10) が用いられている．同じような考え方で，(38.38) で $C=1$ かつ $z_0 = -\infty$ とおいたものを ψ として代入してやれば，(20.3) を使って σ_{abs} を計算

することができる：

$$\sigma_{\rm abs}\approx\frac{2}{\hbar v_\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}V_I(x,y,z)\exp\left[-\frac{2}{\hbar v_\alpha}\int_{-\infty}^{z}V_I(x,y,z')dz'\right]dx\,dy\,dz$$

$$=\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\left\{1-\exp\left[-\frac{2}{\hbar v_\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}V_I(x,y,z)dz\right]\right\}dxdy \qquad (38.43)$$

(38.41) から (38.43) までの関係が実際にお互いに矛盾していないことは明らかである.

(38.40) から (38.43) までの方程式はすべて横方向（トランバース）の座標 x および y についての積分の形をとっている. 1対の (x, y) はそれぞれは一つの古典的な軌道を定義しているものと考えることができる；この軌道はここで考えている近似の範囲では**衝突径数** ***impact parameter*** $b=(x^2+y^2)^{\frac{1}{2}}$ をもつ z 軸に平行な直線になる. なぜならば, §38.13 の末尾で注意しておいたように, 粒子がポテンシャル中を運動する際のその速度の方向についての変化は無視されているからである. そうだとすれば, 散乱振幅および断面積はすべての可能な衝突径数からの寄与の和になるわけである. V が z 軸に関して対称になっている場合には $\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}dxdy$ は $2\pi\int_0^{\infty}bdb$ で置き換えることができる；その場合, たとえば (38.40) の散乱振幅は

$$f(\theta)\approx ik_\alpha\int_0^{\infty}J_0(qb)\left\{1-\exp\left[-\frac{i}{\hbar v_\alpha}\int_{-\infty}^{\infty}V(b,z)dz\right]\right\}bdb$$

$$q\approx k_\alpha\theta \qquad (38.44)$$

となる. ただし J_0 は0次の普通の Bessel 関数である.

38-16 完全吸収体

以上の結果の簡単な一例は完全吸収体によって与えられる.；完全吸収体とは, たとえ $V_I\ll E_\alpha$ であっても $(\hbar v_\alpha)^{-1}\times\int_{-\infty}^{\infty}V_I(x,y,z)dz$ が極めて大きく, その結果指数関数の部分が物体を貫通するすべての軌道 (x, y) に対して1に比べて無視しうる程度に小さくなっている物体である. この場合には (38.41) から (38.43) までの方程式を使って次のことが結論される.

$$\sigma_{\rm el}\approx\sigma_{\rm abs}\approx A \qquad \sigma_{\rm tot}\approx 2A \qquad (38.45)$$

ただし A はその物体の断面のもつ面積である. この結果は (19.24) に関連して注意しておいた結果と密接に関係している. 先の場合には吸収はなかったが, 弾性散乱は半径 a の剛体球による球対称散乱から生じる寄与 πa^2 と前方散乱における回折効果の強め

合いから生じる同じ寄与 πa^2 とにわけることができた．今の場合には大角度の散乱はないが，弾性的な回析散乱が吸収と等しくなっているのである．

吸収体が半径 a の球である場合には，回析散乱の角度による変化は容易に求められる．この場合の（38.44）は

$$f(\theta)\approx ik_\alpha\int_0^a J_0(k_\alpha b\theta)bdb=\frac{ia}{\theta}J_1(k_\alpha a\theta)$$

となり，この弾性散乱の微分断面積 $|f(\theta)|^2$ は $\theta=0$ に1つの山をもつ，その高さは $\frac{1}{4}k_\alpha{}^2a^4$，角度についての幅は $1/k_\alpha a$ 程度になる．全断面積を評価するにはやはりこの場合も θ についての積分の上限を ∞ にまで延長してやればよく，その結果は

$$\sigma_{\rm el}\approx 2\pi\int_0^\infty |f(\theta)|^2\theta d\theta=2\pi a^2\int_0^\infty J_1{}^2(z)\frac{dz}{z}=\pi a^2$$

となって，（38.45）と一致する．

39□解析性と分散式

以上の2節で一般形式を説明するとともにいくつかの応用例をあげてきた定常的な衝突理論は，ある特定のエネルギー値に対する散乱行列および遷移行列の行列要素を扱うものである．議論の大部分は特殊な情況に関するものであったとはいえ，そこで示されたように S 行列について仮定された対称性とユニタリー性とからいくつかの有用な一般的結果を求めることができた．エネルギーおよび散乱角や角運動量のようなその他の物理的なパラメーターを複素変数と見なした場合，S および T 行列がこれらパラメーターの解析関数であるとの仮定から，別の種類の一般的な結果をいくつか求めることができる．これらの結果は**分散(関係)式** *dispersion relations* の形で表わされる．異なったいくつかの物理的なエネルギー値，すなわち複素エネルギーではなくて実のエネルギー値での T 行列要素を結びつける関係は，分散式として典型的なものの一つである．つまりエネルギーが複素量（したがって物理的でない）場合であっても，T 行列要素がエネルギーに関しての解析関数になっていると仮定することによって複素エネルギー平面を通じて物理的なエネルギー値相互間の橋渡しがされることになるのである．

したがって分散式というものは，T 行列要素の解析的な振舞いが確認されたかあるいは推察された後に始めて導くことのできるものなのである．つまり極や分岐切断の

位置や漸近的な形状はわかっているものとされているわけである．最初 Kronig と Kramers によって光学において導き出された際の分散式の基盤になった解析的な振舞いは**因果性** *causality* から推論されたものであった．[1] すなわち，光のシグナルはある限界速度 c をもつこと，したがって散乱された電磁輻射は入射波を追い越すことができないという命題である．この因果性は異なった時刻に起こる事象を結びつけるものであり，その結果電磁場の異なった振動数に対応する Fourier 成分の間にある関係を与えることになる．しかし非相対論的量子力学においては限界速度は何ら存在せず，したがってこの種の因果性はない．したがって一見そこでは分散関係は何ら存在しないものと思われるかもしれない．しかしながら，エネルギーあるいは角運動量の異なった値に対応する Schrödinger 方程式の解はポテンシャルエネルギーがこれらのパラメーターとは無関係である（あるいはわりに複雑な情況ではこれらのパラメーターをある特定の形で含む）という仮定によって実際には結びつけられているのである．

この節ではポテンシャルエネルギーが球対称である場合について角運動量表示での S 行列の対角要素の解析性を先ず最初に考察することにする．この行列要素は（37.36）から $e^{2i\delta_l(k)}$ に等しい．ただしこの l 番目の位相のずれはエネルギーあるいは k によって変化する．その解析的な振舞いが一旦確立されれば分散関係を含んでいくつかの便利な結果を導き出すことができる．このようにして前方散乱の振幅に対する一つの分散式が得られるが，これはポテンシャルが球対称になっている場合に成立するものである．これは光学定理［(20.23)］を仲介にして，前方散乱の微分断面積（これには前方散乱の振幅の実部と虚部の双方の知識が必要になる）を全断面積のエネルギーについての一つの積分と関係づけることになる．

以下では議論を数学的に厳密なものにするつもりはなく，また必要な結果の中のいくつかは証明なしに述べられている．より詳細な導き方は以下に挙げてある参考文献ないしは，それぞれの文献に引用されている原論文に与えられている．

39-1　動　径　解[2]

波動方程式の動径部分（19.2）の正則解は原点近傍での境界条件を使って次のように指

---

1)　たとえば，R. G. Newton, "Scattering Theory of Waves and Particles "(McGraw-Hill, New York, 1966) の §4.2 を見よ．

定することができる.

$$\phi_l(k, \mathbf{r}) \xrightarrow[r \to 0]{} \frac{r^{l+1}}{(2l+1)!!} \tag{39.1}$$

$\phi_l(k, r)$ は k^2 という形でのみ k を含むものであるから, k の偶関数であり, またそれは $V(r)$ を実数量と仮定する以上 k が実数であれば実数量である. ここでは §19 で導入された動径解 $rR_l(r)$ ではなくてむしろこの $\phi_l(k, r)$ を扱ってゆくことにする. その理由は境界条件が (39.1) のように k を含まないものになるからである. このことは Poincaré の一つの定理を利用しうることを意味している. この定理は, (19.2) のような常微分方程式で, パラメーター k への依存性がこの場合の k^2 のように k のある整関数[3] を通じてのみであるという性質をもつものの解に対して適用されるものである. この定理によれば, このパラメーター k に無関係なある境界条件によって指定される解はそれ自身 k の一つの整関数になる. つまり, r を固定すれば $\phi_l(k, r)$ は k の整関数になるが, 一方 $rR_l(r)$ はそうである必要はない.

$\phi_l(k, r)$ は一つの定在波になっており, kr についての正弦的な周期関数をその漸近形にもつものである. (19.2) の進行波の解も同様に利用できるようにするのが便利であるから, 次のような漸近的な境界条件

$$f_l(k, r) \xrightarrow[r \to \infty]{} i^l e^{-ikr} \tag{39.2}$$

によってもう一つの解 $f_l(k, r)$ を定義しておく. 明らかにこの解は原点では正常 (regular) になっていない. つまり原点の近傍ではそれは $rn_l(kr)$ に比例しており, したがってそこでは r^{-l} のような振舞いを示す. [$l=0$ の場合には, §15 の手続きにしたがって, 原点で $rj_0(kr) \propto r$ のような振舞いを示す解を正常な解, $rn_0(kr) \xrightarrow[r \to 0]{}$ const. のような振舞いを示す解を正常でない (irregular) 解と見なすこととする.]

§19 で注意しておいたように, (39.2) の漸近形からは $V(r)$ が r の大きな値に対して $1/r$ 以上に早く零に近づくことが要求される. さらに (39.1) の r のベキの形

---

2) 部分波の振幅の示す解析性についてのより立ち入った説明としては次のものを見れたい: R. G. Newton, *J. Math. Phys.* **1** 319 (1960) および "Scattering Theory of Waves and Particles" (McGraw-Hill, New York, 1966) の第12章; M. L. Goldberger and K. M. Watson "Collision Theory" (Wiley, New, York, 1964) の §6.5; V. De Alfaro and T. Regge, "Potential Scattering" (Wiley, New York, 1965) 第4章, 第5章. Newton の著書に用いられている記法は本書および上にあげた他の参考書で踏襲されているものとはいささか異なっている.

3) k の整関数 (entire function または integral function) とは k のすべての有限値に対して正則である k の解析関数のことである.

から $V(r)$ が $r\to 0$ とともに無限大になるのは $1/r^2$ よりも早くないことが要求されることも容易にわかる．実際にはこの節を通じて次のようなより強い条件を仮定しておくことにする．場合に応じてはさらにきびしい形で $V(r)$ の漸近的な振舞いを制限することになろう．

$$\int_0^\infty r|V(r)|dr<\infty \qquad \text{および} \qquad \int_0^\infty r^2|V(r)|dr<\infty \tag{39.3}$$

第3の解 $f_l(-k,r)$ は $k=0$ の点を除けば $f_l(k,r)$ とは1次独立になっており，次の漸近形をもつ．

$$f_l(-k,r)\xrightarrow[r\to\infty]{} i^l e^{ikr} \tag{39.4}$$

要するに $\phi_l(k,r)$ は $f_l(\pm k,r)$ の一次結合として表わすことができるのである．このことは §19 の議論にしたがっていえば，漸近領域における $rR_l(r)$ を $e^{\pm ikr}$ の1次結合として書き表わす手つづきに対応している．これら2個の項の係数間の比が本質的には（37.36）の S 行列要素になる：

$$S_l(k)\equiv e^{2i\delta_l(k)} \tag{39.5}$$

したがって，$f_l(k,r)$ の解析性を調べてゆき，$\phi_l(k,r)$ が k の整関数であるという事実を利用することによって $S_l(k)$ の解析性を調べることができるわけである．

$f_l(k,r)$ の解析性は先にあげた文献でなされているように，それが満たす積分方程式を調べることによって確定することができる．その結論は次のようになる：$r>0$ の値を固定すれば $f_l(k,r)$ は複素 k 平面の下半分の開域において正則になっている；さらにそれは $k=0$ の点を除いて実軸上で連続である．もしもポテンシャルが（39.3）だけでなくさらに

$$\int_0^\infty r|V(r)|e^{\mu r}dr<\infty \qquad \mu>0 \tag{39.6}$$

という条件を満たしているならば，$f_l(k,r)$ の正則域には $k=0$ での l 次の極を除いた k 平面の上半分で $\mathrm{Im}\,k<\frac{1}{2}\mu$ になっている帯状の領域がさらに含まれる．なお，もしも $V(r)$ がどんな指数関数よりも早く零に近づく場合，したがって（39.6）が任意に大きな μ に対して満たされているならば，その場合の $k^l f_l(k,r)$ は $r>0$ のすべての固定値に対して k の整関数になる．このことはたとえば $V(r)$ が大きな r の値に対して Gauss 関数的に零になってゆくか，あるいはある有限値以上の r に対して恒等的に零に

なっている場合におこることになる.

(39.2), (39.4) および微分方程式 (19.2) の実数性から, k の実数値に対する次の関係が導かれる.

$$[f_l(-k,r)]^*=(-1)^l f_l(k,r) \tag{39.7}$$

ここでもしも実軸から離れてゆくがしかし $f_l(k,r)$ が解析的である領域内には止まっている場合を考えれば, f_l が k に関して満たしているのと同一の方程式を f_l^* が k^* に関して満たしていることがわかる. そうすれば (39.7) を

$$[f_l(-k^*,r)]^*=(-1)^l f_l(k,r) \tag{39.8}$$

で置き換えてやれば, (39.2) と (39.4) の境界条件は複素変数 k に対してお互いに両立可能になる. 同様な考え方によれば, $\phi_l(k,r)$ が実数の k に対して実数値をとる k の整関数であるという事実は, Schwarz の鏡映原理によって, すべての有限な複素数 k に対して

$$[\phi_l(k^*,r)]^*=\phi_l'(k,r) \tag{39.9}$$

を意味することになる.

39-2 Jost 関数

(39.4) のすぐ後で注意しておいたように, $\phi_l(k,r)$ を $f_l(\pm k,r)$ の一次結合として表わすことができる. この一次結合を $\phi_l(k,r)$ が k の偶関数であるという要求に見合う次の形に書いておく.

$$\phi_l(k,r)=\tfrac{1}{2}ik^{-l-1}[f_l(-k)f_l(k,r)-(-1)^l f_l(k)f_l(-k,r)] \tag{39.10}$$

この係数 $f_l(k)$ は **Jost 関数** *Jost function*[1] とよばれており, $S_l(k)$ と密接な関係がある. この関係は (39.10) の漸近形

$$\phi_l(k,r)\xrightarrow[r\to\infty]{}\frac{1}{2}\left(\frac{i}{k}\right)^{l+1}[f_l(-k)e^{-ikr}-(-1)^l f_l(k)e^{ikr}] \tag{39.11}$$

を, (19.8) で与えられる $rR_l(r)$ の漸近形

$$rR_l(r)\xrightarrow[r\to\infty]{}\frac{1}{2k}i^{l+1}e^{i\delta_l}[e^{-ikr-i\delta_l}-(-1)^l e^{ikr+i\delta_l}] \tag{39.12}$$

と比較することによって求められる. つまりこの比較と (39.5) の定義式から次の関係が導かれる.

1) R. Jost, *Helv. Phys. Acta.* **20**, 256 (1947).

$$S_l(k)=e^{2i\delta_l(k)}=\frac{f_l(k)}{f_l(-k)} \tag{39.13}$$

(39.13) の形から十分予想されるように，S 行列要素の解析性は Jost 関数の解析性よりは幾分より複雑なものになる；たとえば $S_l(k)$ は一般に $f_l(k)$ の極と $f_l(-k)$ の零点の両方に極をもっている.

(39.10) の複素共軛式は

$$[\phi_l(k,r)]^*=-\tfrac{1}{2}i(k^*)^{-l-1}[f_l(-k)f_l(k,r)-(-1)^l f_l(k)f_l(-k,r)]^*$$

となるが，この方程式を通じて k を k^* で置き換え，(39.8) と (39.9) を利用すれば

$$[f_l(-k^*)]^*=f_l(k) \tag{39.14}$$

となることがわかる．k の実数値に対しては，(39.13) および (39.14) は $|S_l(k)|=1$，つまり S 行列がユニタリーで $\delta_l(k)$ が実数であることを示しているが，このことは実数ポテンシャルに対しては予想されるところである．なお，k の実数値に対しては

$$f_l(k)=|f_l(k)|e^{i\delta_l(k)} \tag{39.15}$$

であることも導かれる.

ここでいよいよ $\phi_l(k,r)$ および $f_l(k,r)$ の解析性に関する知識を利用して $f_l(k)$ の解析性を決定したいわけである．この目的を果すために，$f_l(k)$ を定義している (39.10) を使って，$\phi_l(k,r)$ と $f_l(k,r)$ を用いた $f_l(k)$ に対する具体的な表式を求める．それには，(19.2) という形の微分方程式に対しては，同じ k をもつこの方程式の任意の2個の解から作ったウロンスキアン (Wronskian)

$$W[f_l(k,r),\phi_l(k,r)]\equiv f_l(k,r)\frac{\partial}{\partial r}\phi_l(k,r)-\phi_l(k,r)\frac{\partial}{\partial r}f_l(k,r)$$

が r に関係しないということに注目する．これに (39.10) を代入してみれば

$$W[f_l(k,r),\phi_l(k,r)]=\tfrac{1}{2}i(-k)^{-l-1}f_l(k)W[f_l(k,r),f_l(-k,r)]$$

となる．右辺のウロンスキアンの大きな r に対する値は (39.2) と (39.4) の漸近形を利用すれば求めることができて，その結果は次のようになる.

$$f_l(k)=k^l W[f_l(k,r),\phi_l(k,r)] \tag{39.16}$$

$f_l(k,r)$ および $\phi_l(k,r)$ の r についての微係数は k に関しては元の関数と同じ解析性をもつ．したがって $\phi_l(k,r)$ が k の整関数である以上，$f_l(k)$ は $k^l f_l(k,r)$ と同一の解析性をもつことを (39.16) は示しているわけである．たとえば，もしも $V(r)$ が有限の作用距離のものであるならば，$f_l(k)$ は k の整関数である.

39-3 強化因子

(36.15) からわかるように，複素 Jost 関数の偏角 (argument) は散乱による位相のずれになっている．同時に注目すべき興味ある点として，その大きさ $|f_l(k)|$ が次のような簡単な物理的解釈をもつということがある．(39.11) と (39.12) とを比較すればわかるように

$$rR_l(r)=\frac{k^l}{f_l(-k)}\phi_l(k,r) \tag{39.17}$$

したがって，r が零に近づくにつれて，(39.1) からわかるように $R_l(r)$ は $r(kr)^l/f_l(-k)(2l+1)!!$ に近づくが，一方自由解 $rj_l(kr)$ は (15.7) からわかるように $r(kr)^l/(2l+1)!!$ に近づいてゆく．つまり，原点付近での波動関数の大きさには，散乱ポテンシャルのために $1/|f_l(k)|$ という因子がかかることになる．このような**強化因子** ***enhancement factor*** は散乱ないしは創成の過程の終状態における粒子間の相互作用の効果を算出する際に重要なものになってくる.[1]

39-4 大きな $|k|$ に対する Jost 関数

$f_l(k)$ の漸近的性質は先にあげた参考文献において確定されており，ここでそれらを導くことはしないでおく．結論は，実軸上および複素 k 平面の下半面で

$$f_l(k)\xrightarrow[|k|\to\infty]{}1+\frac{\mu}{k\hbar^2}\int_0^\infty V(r)dr \qquad \mathrm{Im}\,k\le 0 \tag{39.18}$$

ただし，この積分に有限であると仮定されている．

$V(r)$ は実数である以上，(39.15) と (39.18) からわかるように k の実数値に対しては

$$\delta_l(k)\xrightarrow[k\to\infty]{}-\frac{\mu}{k\hbar^2}\int_0^\infty V(r)dr \tag{39.19}$$

となる．この結果は (38.14) で与えられている位相のずれに対する Born 近似と比較されてよいものである．というのは，k が十分大きくなった極限で l の値が固定されておれば (15.8) からわかるように，$j_l^2(kr)$ は r の最小値を除くすべての値に対して $1/2k^2r^2$ で近似することができ，そうすれば (38.14) と (39.19) とは一致することになるからである．

---

1) たとえば，J. Gillespie, "Final-State Interactions" (Holden-Day, San Francisco, 1964) の p. 17 を見よ．

39-5　束縛状態

もしも束縛状態が存在するとすれば，それはある正則な解 $\phi_l(k,r)$ によって記述されるが，この解に対しては k^2 は実でかつ負で，r の大きな値に対するこの解の r についての依存性は減少してゆく指数関数になっている．このことは，(39.11) の漸近式の二つの項の中の一つが零でなければならないことを意味している．；二つの場合のいずれにおいても同一の結果が得られることは容易にわかる．$k=\pm i\kappa$ とし，$k=i\kappa$ が実軸と連結している $f_l(k)$ の解析領域内にあるものとすれば，

$$\phi_l(\pm i\kappa, r) \underset{r\to\infty}{\longrightarrow} \tfrac{1}{2}(-\kappa)^{-l-1} f_l(i\kappa) e^{-\kappa r} \qquad f_l(-i\kappa)=0 \qquad \kappa>0 \tag{39.20}$$

という漸近式によって一つの束縛状態が与えられることになる．このような状態のエネルギーは $-\hbar^2\kappa^2/2\mu$ である．

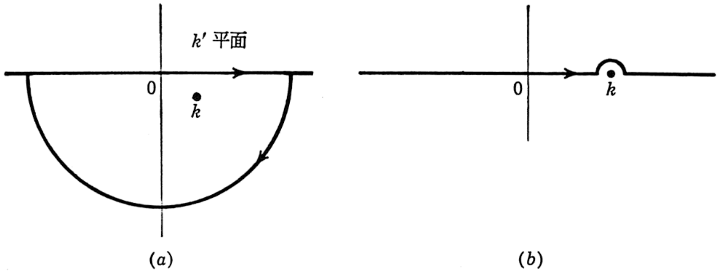
この場合には負の虚数の k 軸上である Jost 関数の一つの零点が一つの束縛状態に対応することが結論される．さらにこの場合 $f_l(i\kappa)$ は零になり得ない．というのは (39.20) によればこのことは $\phi_l(i\kappa, r)$ を恒等的に零にすることになるからである；要するに (39.13) の S 行列要素は $k=-i\kappa$ に一つの零点を $k=i\kappa$ に一つの極をもつ．このような零点および極が単純な零点および極になっていることも証明することができる．Jost 関数の負の純虚数の零点はすべて束縛状態を与えるというものの，このことは $S_l(k)$ のすべての負の純虚数の零点あるいは正の純虚数の極についてはいえない；このような場合の一例は以下で有効領域の理論に関連して与えられるはずである．

39-6　Jost 関数に対する分散式

関数 $f_l(k)-1$ はポテンシャルが (39.3) の条件を満たしているならば $\mathrm{Im}\,k\le 0$ に対して解析的になる；なお，(39.18) によればこの関数は $|k|\to\infty$ とともに $1/k$ のオーダーになる．したがって，Cauchy の定理を利用すれば次のように書き表わすことができる．

$$f_l(k)-1=-\frac{1}{2\pi i}\int_C \frac{f_l(k')-1}{k'-k}dk' \qquad \mathrm{Im}\,k<0 \tag{39.21}$$

ただし積分路 C は図36a に示されている．半円周上での積分はその半径を無限大に近づけていった極限では零になるため，この積分路についての積分は実軸全体にわたっての積分で置き換えることができる．その場合には，図36b のように，下半面から k を実軸



第36図 (39. 21) の値を求めるための積分路

に近づけていった極限をとればよい. k を回る半円の半径を零に近い小さいものとすれば, 実軸に沿った積分はその主値になり, 半円上での積分は $-\pi i[f_l(k)-1]$ になる. 結局, (39. 21) は次のようになる.

$$f_l(k)-1=\frac{i}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{f_l(k')-1}{k'-k}dk' \qquad k: \text{実数} \tag{39. 22}$$

$f_l(k)$ の実部と虚部とを結びつける方程式は (39. 22) の実部と虚部とをとることによって求めることができる. :

$$\begin{aligned}\mathrm{Re}\,[f_l(k)-1]&=-\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{Im}\,[f_l(k')-1]}{k'-k}dk'\\ \mathrm{Im}\,[f_l(k)-1]&=\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{Re}\,[f_l(k')-1]}{k'-k}dk'\end{aligned} \tag{39. 23}$$

$f_l(k)-1$ の実部と虚部とは (39. 23) の関係を満たしているという意味で, お互いに他の**ヒルベルト変換** *Hilbert transform* になっていると言われる. 分散式としての (39. 23) は, 位相のずれに対する Born 近似 (38. 14) から出発することにすれば, 一つの近似計算の基礎として利用できるものである. つまり, (39. 17) の直ぐ次の議論によれば, 散乱ポテンシャルが存在しない場合には $f_l(k)=1$, したがって $\mathrm{Im}\,[f_l(k)-1]=\delta_{Bl}(k)+0(V^2)$. この関係を (39. 23) の最初の式に代入すれば $\mathrm{Re}\,[f_l(k)-1]$ に対する1つの近似式を求めることができ, 次に (39. 15) を使った $f_l(k)$ の虚部と実部との比の式から $\tan\delta_l(k)$ に対する表式としてある改良されたものが得られるわけである.[1]

1) J. J. Giambiagi and T. W. B. Kibble, *Ann. Phys.* (*N. Y.*) **7**, 39 (1959).

39-7 $\ln f_l(k)$ に対する分散式

(39.21) で $f_l(k)-1$ の代りに $\ln f_l(k)$ から出発することにすればもう一つの分散式を求めることができる．一応，束縛状態が存在しないものと仮定すれば，$\ln f_l(k)$ もまた下半面で解析的であり，$|k|\to\infty$ につれて $1/k$ のオーダーになる．一方，(39.15) からは $\ln f_l(k)=\ln|f_l(k)|+i\delta_l(k)$ となる．ただし，$\delta_l(k)$ は (38.14) および (39.19) の関係に合せて $k=\pm\infty$ でのその値が零になるように定義されているものとする．そうすれば，(39.23) の最初の式は

$$\ln|f_l(k)|=-\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\delta_l(k')}{k'-k}dk \tag{39.24}$$

となる．この方程式の両辺に $i\delta_l(k)$ を加えてみる，その場合左辺は $\ln f_l(k)$ になり，右辺では $i\delta_l(k)$ の代りに

$$-\frac{1}{\pi}\int_{C'}\frac{\delta_l(k')}{k'-k}dk'$$

と置くことができる．ただし，C' は図36b の小さな半円である．結局次の関係が得られる．

$$\ln f_l(k)=-\frac{1}{\pi}\int_{C''}\frac{\delta_l(k')}{k'-k}dk'$$

ただし C'' は図36b に示されている積分路の全体である．この関係はまた次のような実軸の全体に沿っての一つの積分として書き表わすことができる．

$$\ln f_l(k)=-\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\delta_l(k')}{k'-k+i\epsilon}dk' \tag{39.25}$$

ただし右辺の積分は $\lim\epsilon\to0^+$ を意味するものと解されることにする．

39-8 束縛状態の効果

これまでのところでは，束縛状態は存在しないものと仮定してきた．もしもエネルギー $E_n<0$ をもつ束縛状態が存在するならば，これらの状態は $k=-i\kappa_n$ で $f_l(k)$ の零点をつくる．ただし，$\kappa_n=+(-2\mu E_n/\hbar^2)^{\frac{1}{2}}$．これらの $f_l(k)$ の零点は $\ln f_l(k)$ の分岐点を生じ，§39.6 の議論は通じないことになる．しかしながら次のような既約された Jost 関数を定義することができる．

$$\bar{f}_l(k)\equiv f_l(k)\prod_n\frac{k-i\kappa_n}{k+i\kappa_n} \tag{39.26}$$

つまり，$\ln \bar{f}_l(k)$ は束縛状態がない場合に $\ln f_l(k)$ がもつのと同一の解析性および漸近的性質をもつわけである．今度の場合には，(39.15) の代りに $\bar{f}_l(k)=|\bar{f}_l(k)|e^{i\bar{\delta}_l(k)}$ ただし $|\bar{f}_l(k)|=|f_l(k)|$ かつ

$$\bar{\delta}_l(k)=\delta_l(k)+i\sum_n\left[\ln\left(1+\frac{i\kappa_n}{k}\right)-\ln\left(1-\frac{i\kappa_n}{k}\right)\right] \tag{39.27}$$

となる．要するに (39.25) の分散式は f_l および δ_l の上にバーの記号をつければそのまま成立するわけである．

そこで (39.27) を (39.25) の被積分関数に代入すると，対数項の中の第一のグループのそれぞれの項からは分岐点が $k'=-i\kappa_n$ と $k'=0$ で導入されるが，それらは切断によって連結することができる．したがって，この実軸に沿っての積分路を，積分の結果には何ら寄与しない上半面の無限半円周を使って閉じさせることができる．$k'=0$ での分岐点は実軸に沿ってのこの積分に関しては少しも面倒をひきおこさない．というのは，この積分は始めから丁度 $k'=0$ での主値とみなしうるものになっており，対数の項は原点の無限小近傍では何らの寄与をも与えないからである．結論としては，対数項の中の第一グループの各項は $k'=k-i\epsilon$ での極が積分路の外部にあるためそれぞれの積分は零になる．第二グループの分岐点は $i\kappa_n$ および 0 にあり，したがって積分路は下半面内の無限半円を使えば閉じられ，それには $k-i\epsilon$ での極が含まれる．

結局，(39.25) の f_l および δ_l の上にバー記号を付けた関係は次のようなものになる．

$$\ln \bar{f}_l(k)=-\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\delta_l(k')}{k'-k+i\epsilon}dk'+2\sum_n\ln\left(1-\frac{i\kappa_n}{k}\right)$$

ここで (39.26) によって $\bar{f}_l$ を f_l を使って書き直せば次式が得られる．[1]

$$\ln f_l(k)=-\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\delta_l(k')}{k'-k+i\epsilon}dk'+\sum_n\ln\left(1+\frac{\kappa_n^2}{k^2}\right) \tag{39.28}$$

$|f_l(k)|$ に対する方程式は (39.24) に類似の次のものになる．

$$\ln|f_l(k)|=-\frac{1}{\pi}P\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\delta_l(k')}{k'-k}dk'+\sum_n\ln\left(1+\frac{\kappa_n^2}{k^2}\right) \tag{39.29}$$

(39.28) によって $f_l(k)$ を，したがってまた $S_l(k)$ を散乱による位相のずれと束縛状態のエネルギー $-\hbar^2\kappa_n^2/2\mu$ を使って計算することが可能になる；同様に強化因子

---

1) R. Jost and W. Kohn, *Phys. Rev.* **87**, 977 (1952) ; R. G. Newton, *J. Math. Phys.* **1**, 319 (1960) 第5節.

$1/|f_l(k)|$ も (39.29) から計算することができる.

これらの方程式を利用する際に注意することは, (39.14) および (39.15) からすれば k の実数値に対して

$$f_l(k)\neq 0 \qquad ならば \qquad e^{i\delta_l(-k)}=e^{-i\delta_l(k)} \tag{39.30}$$

ということである. ところで, $k=\pm\infty$ では $\delta_l(k)$ が零になるという以前からの規約を踏襲しておくのが便利である; この規約は (38.14) および (39.19) と一致しており, その場合 k の実数値に対しては $\delta_l(-k)=-\delta_l(k)$ であることが (39.30) から導かれる. しかしながら, このことは必ずしも $\delta_l(0)=0$ であることを意味するものではない. というのは, k を零にその両側から近づけてゆくときの $\delta_l(k)$ の極限値は同一である必要はないからである. その意味で, これまでの規約を次のように拡張しておくことにする.

$$k\neq 0 \text{ の実数値に対して} \qquad \delta_l(-k)=-\delta_l(k) \qquad \delta_l(k)\xrightarrow[k\to\infty]{} 0 \tag{39.31}$$

39-9 Levinson の定理

与えられた l をもつ束縛状態の個数 n_l とそれに対応する位相のずれ, ただし k の正の値からの極限として定義されたエネルギー零での位相のずれ $\delta_l(0)$ との間には, 一つの興味ある関係が存在する. 差しあたり $f_l(0)\neq 0$ と仮定して, 次の線積分をつくってみる

$$-\frac{1}{2\pi i}\int_C \frac{f_l'(k)}{f_l(k)}dk=-\frac{1}{2\pi i}\int_C d[\ln f_l(k)] \tag{39.32}$$

ただし積分路 C は図36a に示されているものとする. この被積分関数は, そのおのおのが1つの束縛状態に対応している $f_l(k)$ の零点において単位の強さの極をもっている. したがって, (39.32) の左辺の積分は n_l に等しい. 一方前と同様に, $\ln f_l(k)=\ln|f_l(k)|+i\delta_l(k)$ とおくことができる.; $f_l(k)$ は積分路をたどる間中連続的に変化してゆき, しかもこの積分路上で零になることはない. したがって $\ln|f_l(k)|$ も連続で右辺でのこの項の積分は零である. ところで (39.31) によれば $\delta_l(k)$ は原点のすぐ右側の積分路の一つの端点での $\delta_l(0)$ の値から, 原点のすぐ左側の他の端点での値 $-\delta_l(0)$ まで連続的に変化してゆく. したがってこの積分は $-2i\delta_l(0)$ に等しい. このようにして, **Levinson の定理** *Levinson's theorem*[1] の一部である次の結果が得られる:

1) N. Levinson, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab,, Mat.-Fys. Medd.* **25** (9) (1949).

$$\delta_l(0)=\pi n_l \qquad f_l(0)\neq 0 \tag{39.33}$$

$f_l(0)=0$ になる例外的な情況に対しては，積分路を無限小半径 ϵ の半円だけ下半面内に凹まさなければならない．被積分関数の実部 $\ln|f_l(k)|$ が積分に寄与しないということはこの場合にもやはりいえる．ただし，この無限小半円周に沿っての虚部の積分からの寄与が付け加わる．これを計算するには，$f_l(k)$ が $k\to 0$ とともにどのように零に近づくかを知らねばならない．$f_l(0)=0$ であるとするならば $f_l(k)\approx ak^q$，ただし $l=0$ に対しては $q=1$ で $l>0$ に対しては $q=2$ であることを証明することができる．そこで ϕ が π から 2π までの値をとるとして半円周上で $k=\epsilon e^{i\phi}$ とおけば，$\ln f_l(k)$ の虚部は $q\phi$ で，半円周にわたってのその積分は $i\pi q$ となる．結局，この凹ました積分路に関しての完全な積分（39.32）は

$$\frac{1}{\pi}\delta_l(0)-\pi q \tag{39.34}$$

に等しくなる．

$l=0$ とすれば $k=0$ での $f_0(k)$ の零点は束縛状態には対応しない．この場合の情況は §19 および §34 で議論された共鳴散乱の場合と同種のものになっている；すなわち，遠心力の障壁が存在せず（$l=0$）かつ（39.3）に従う（したがって V は $1/r^3$ よりも速く減少する）ポテンシャルがあるため，波動関数が外に“しみ出していく”わけである．このとき n_0 は $q=1$ とした（39.34）に等しく，したがって

$$\delta_0(0)=\pi(n_0+\tfrac{1}{2}) \qquad f_0(0)=0 \tag{39.35}$$

$l>0$ とすれば $k=0$ での $f_l(k)$ の零点は確かに1つの束縛状態に対応する．なぜならば，§34 で示したように，遠心力の隔壁が零エネルギーの波動関数のしみ出てゆくのを妨げるからである．ただしこの状態は積分路を凹ますことによって排除されていたのであるから，n_l は $q=2$ とした（39.34）より1単位だけ大きくなる，つまり n_l は $\delta_l(0)/\pi$ に等しい．これは（39.33）と同じ結果である．そこでこの結果と（39.35）とをまとめて両方の場合を次のように書き表わすことができる．

$$\begin{aligned}&l=0\ \text{かつ}\ f_l(0)=0\ \text{の場合} \qquad && \delta_l(0)=\pi(n_l+\tfrac{1}{2})\\ &\text{その他の場合} && \delta_l(0)=\pi n_l\end{aligned} \tag{39.36}$$

（39.36）は Levinson の定理を完全な形で述べたものに他ならない．

39-10 有効領域

Jost 関数というものの簡単かつ具体的な一例として，まず次のようなものを考えてみる．

$$f_0(k)=\frac{k+i\kappa}{k-i\alpha} \tag{39.37}$$

ただし κ および α は正の実数とする．[これは $l>0$ に対しては $f_l(k)$ の1からのずれはすべて無視することに当っている．] この $f_0(k)$ は (39.18) の正しい漸近性をもつことを注意しておく．すなわち，それはエネルギー $-\hbar^2\kappa^2/2\mu$ の束縛状態に対応する $k=-i\kappa$ の点で単純な零点をもち，$k=i\alpha$ での単純な極を除いては解析的になっている．(39.37) は次のように書き直すこともできる．

$$\begin{aligned} f_0(k)&=\left(\frac{k^2+\kappa^2}{k^2+\alpha^2}\right)^{\frac{1}{2}}e^{i\delta_0(k)} \\ \delta_0(k)&=\tan^{-1}\frac{\kappa}{k}+\tan^{-1}\frac{\alpha}{k}=\tan^{-1}\frac{k(\kappa+\alpha)}{k^2-\kappa\alpha} \end{aligned} \tag{39.38}$$

低エネルギー散乱についての知識，特に原子核物理学におけるこの種の知識は，$k\cot\delta_0(k)$ の k^2 についてのベキ級数展開として提供されることがしばしばある．:

$$k\cot\delta_0(k)=-\frac{1}{a}+\tfrac{1}{2}r_0k^2+\cdots \tag{39.39}$$

この場合，a は**散乱の長さ** *scattering length*, r_0 は**有効領域** *effective range* とよばれている．(39.38) の第二式からは

$$k\cot\delta_0(k)=-\frac{\kappa\alpha}{\kappa+\alpha}+\frac{k^2}{\kappa+\alpha} \tag{39.40}$$

となり，したがって有効領域の公式は今考えている場合の散乱を正確に記述するものになっていることがわかる．[1] (39.39) と (39.40) とを比較して次の関係が得られる．

$$r_0=\frac{2}{\kappa+\alpha} \qquad a=\frac{1}{\kappa}+\frac{1}{\alpha} \tag{39.41}$$

(39.37) が実験的な情況を記述するためには，実験的に決定可能な3個のパラメーター，a, r_0 および κ が，(39.41) から α を消去することによって得られる次の方程式を満たしていることが必要である：

$$\frac{1}{a}=\kappa-\tfrac{1}{2}r_0\kappa^2 \tag{39.42}$$

---

1) V. Bargmann, *Rev. Mod. Phys.* **21**, 488 (1949); R. G. Newton, *J. Math. Phys.* **1**, 319 (1960), 第10節の (f).

事実三重項のスピン状態における中性子-陽子散乱は（39.42）の方程式とよくあっている．この場合の κ は重陽子の束縛状態に対応するものになる（§50 を見よ）．

（39.37）に対応する S 行列要素は，（39.13）から

$$S_0(k)=\frac{(k+i\kappa)(k+i\alpha)}{(k-i\kappa)(k-i\alpha)} \tag{39.43}$$

となるが，明らかにこれに含まれる知識は Jost 関数よりは少ない．というのは，$S_0(k)$ だけからでは束縛状態に対応するのが κ あるいは α のどちらであるかを言うわけにゆかないからである．このことは（39.20）の次のパラグラフでの注意の具体的な一例を与えるものである．

有効領域の理論は束縛状態が存在しないときでもやはり利用することができる．α は固定されたままで，κ が零にまで減少していって，次いで負になるという情況を考えてみよう．$\kappa=0$ のときには，（39.37）からわかるように $f_0(0)=0$，したがって零エネルギー共鳴が存在する；なおこのとき散乱の長さは無限大になることは（39.41）からわかる．κ が小さくかつ負であるときには散乱の長さは負になるが，この種のパラメーターを適当に選べば一重項のスピン状態での低エネルギー中性子-陽子散乱を記述することができるのである．

これら三つの場合のすべてに対して，位相のずれ $\delta_0(k)$ は k が無限大から減少してゆくにつれて最初は零から増大してゆくが，束縛状態があればそれは $k=0$ での値 π まで単調に増大し，零エネルギー共鳴の場合には $\frac{1}{2}\pi$ まで増大してゆく．κ が負であるときには，位相のずれは一つの極大値を経過したのち，$k=0$ での値零にまで減少してゆく．この種の振舞いはすべて（39.36）の Levinson の定理に適ったものになっている．

39-11 前方散乱振幅

ここではポテンシャルが球対称であることをやはり仮定した上で，前方散乱振幅に対する分散式を導き出す．[1] それには（37.21）によって振幅と関係づけられている T 行列要素を取扱ってゆくのが便利である．すなわち

---

1) N. N. Khuri, *Phys. Rev.* **107**, 1148 (1957); A. Klein and C. Zemach, *Ann. Phys.* (*N. Y.*) **7**, 440 (1959). ここでの取扱いは M. L. Goldberger and K. M. Watson, "Collision Theory" (Wiley, New York, 1964) の §10.4 での取扱いに最も近い形で述べられている．

$$T(E_\alpha)\equiv|C|^{-2}\langle\alpha|T|\alpha\rangle=|C|^{-2}\int u_\alpha^*(\mathbf{r})V(r)\chi_\alpha^+(\mathbf{r})d^3r$$
$$=-\frac{2\pi\hbar^2}{\mu}f(\mathbf{k}_\alpha,\mathbf{k}_\alpha) \qquad (39.44)$$

で定義される T 行列要素を考える．これに (37.17) を代入すると

$$T(E_\alpha)=|C|^{-2}\left[\int u_\alpha^*(\mathbf{r})V(r)u_\alpha(r)d^3r\right.$$
$$\left.+\hbar^{-1}\iint u_\alpha^*(\mathbf{r}')V(r')G_{\omega_\alpha}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})V(r)u_\alpha(\mathbf{r})d^3r'd^3r\right]$$

となり，結局次の形になる．

$$T(E)=T_B+\hbar^{-1}\iint\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')V(r')G_\omega^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})V(r)$$
$$\times\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})d^3r'd^3r$$
$$T_B=\int V(r)d^3r \qquad (39.45)$$

ここで T_B はエネルギーに関係しない Born 行列要素で，添字 α ははぶかれている．

(39.45) に出てくる Green 関数は (37.8) で定義されている．連続体に対しては δ 関数による規格化を採用し，(37.8) 中の一般化された和 S_α を束縛状態 n についての和と連続体をつくっている状態 α にわたっての積分に分割しておく：すなわち

$$\hbar^{-1}G_\omega^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})=\sum_n\frac{\chi_n(\mathbf{r}')\chi_n^*(\mathbf{r})}{E-E_n}+\int d\alpha\frac{\chi_\alpha(\mathbf{r}')\chi_\alpha^*(\mathbf{r})}{E-E_\alpha+i\epsilon} \qquad (39.46)$$

χ_n は1に規格化されており，この χ_n についての和においては $i\epsilon$ をつけなくてよいのは E_n が負であるためである．連続状態の規格化は，$\chi_\alpha(\mathbf{r})$ が漸近形 $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ をもつとした場合微分 $d\alpha$ が $d^3k/(2\pi)^3$ になるようにとっておく．

(39.46) からわかるように G_ω^+ を複素変数としての E の一つの関数とみなせば，それは束縛状態のエネルギーである負の実数値 E_n と正の実軸の直ぐ下のそれに平行な切断を除けばあらゆる点で解析的である．ところでこの $T(E)$ は，

$$T(\mathbf{r}',\mathbf{r},E)\equiv\hbar^{-1}G_\omega^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})V(\mathbf{r}')V(\mathbf{r})\exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')] \qquad (39.47)$$

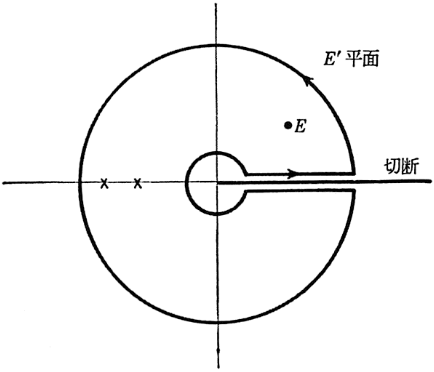
という定義を使えば次のように書ける．

$$T(E)=T_B+\iint T(\mathbf{r}',\mathbf{r},E)d^3r'd^3r \qquad (39.48)$$

$T(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E)$ の解析性は $G_\omega{}^+$ の解析性と同一であり，したがって (39.21) のときと同様に，Cauchy の定理から出発することによって，それに対する一つの分散式を求めることができる．つまり積分

$$\frac{1}{2\pi i}\int_C \frac{T(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E')}{E'-E}dE'$$

を考える．ただしこの積分路 C は第37図に示されているように切断を横切らないものである．この積分は図では×印で図式的に記されている束縛状態に対応する極での留数の和と E にある極からくる留数とを一緒にしたものに等しい：すなわち



第37図　(39.49) の積分路 C

$$\frac{1}{2\pi i}\int_C \frac{T(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E')}{E'-E}dE' = \sum_n \frac{\Gamma_n(\mathbf{r}', \mathbf{r})}{E_n - E} + T(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E) \qquad (39.49)$$

ここで $\Gamma_n(\mathbf{r}', \mathbf{r})$ は $E=E_n$ の極での $T(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E)$ の留数である；すなわち $T(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E)$ は $E=E_n$ の近傍では $\Gamma_n(\mathbf{r}', \mathbf{r})/(E-E_n)$ のような振舞いを示すことになる．

39-12　$T(E)$ に対する分散式

積分路は次の三つの部分から構成されている：原点の周りの無限小円，切断の両側つまり正の実軸に接してすぐ上およびすぐ下の直線および大きな円．ただしこの大きい円の半径を E_0 とする．無限小の円に関しては，(39.46) から察せられるように，$G_\omega{}^+$ に対する束縛状態の寄与はこれらの状態が有限の負エネルギーをもつものと仮定されている以上，$E \to 0$ につれて有限になる．連続体をつくる状態の $G_\omega{}^+$ に対する寄与もまた，

分母の E_α 中の k^2 が微分 d^3k 中の k^2 によって帳消しにされるため，有限になる．したがって（39.47）を使えば切断を入れた平面では $T(\mathbf{r}',\mathbf{r},E)$ は $E'\to 0$ に際して有限である．そして無限小円からの寄与がないことがわかる．

正の実軸の両側からの（39.49）の左辺に対する寄与は次のように書ける．

$$\frac{1}{2\pi i}\int_0^{E_0}\frac{T(\mathbf{r}',\mathbf{r},E'^+)-T(\mathbf{r}',\mathbf{r},E'^-)}{E'-E}dE$$

ただし $E'^\pm$ は切断のすぐ上およびすぐ下の E である．この積分を，（39.48）でなされているように $\mathbf{r}$ および $\mathbf{r}'$ について積分されたときに同一の結果を与える表式

$$\frac{1}{2\pi i}\int_0^{E_0}\frac{T(\mathbf{r}',\mathbf{r},E'^+)-T(\mathbf{r},\mathbf{r}',E'^-)}{E'-E}dE'$$

で置き換えるのが便利である．ここで $T^*(\mathbf{r}',\mathbf{r},E^+)=T(\mathbf{r},\mathbf{r}',E^-)$ であることを証明することにしよう．いま問題にしているのは，時間反転に対する不変性をもっている情況であり，したがって V は実の量である．；さらに $\{\exp[ik^+\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]\}^*=\exp\{i\mathbf{k}^-\cdot(\mathbf{r}'-\mathbf{r})]$，したがって（39.47）にしたがえば $G_{\omega^+}{}^{+*}(\mathbf{r}',\mathbf{r})=G_{\omega^-}{}^*(\mathbf{r},\mathbf{r}')$ であることを証明しさえすればよい．（36.22）および（37.8）からわかるように時間事転をとってみれば $G_{\omega^+}{}^{+*}(\mathbf{r}',\mathbf{r})=G_{\omega^-}(\mathbf{r},\mathbf{r}')$；しかしながら，ここでは実軸からずれているので $\epsilon\to 0$ の極限をとることができて，G^+ と G^- の区別はなくなる．結局，被積分関数の分子の第二項が第一項の複素共軛になっていることが確かめられた．したがって（39.49）の左辺に対する実軸に沿っての積分からの寄与は

$$\frac{1}{\pi}\int_0^{E_0}\frac{\mathrm{Im}\,T(\mathbf{r}',\mathbf{r},E^+)}{E'-E}dE' \qquad (39.50)$$

となる．

最後に大きな円からの寄与は $E_0\to\infty$ の極限では零になることを示すことにしよう．それには注意深い分析が必要になるがそれは先に挙げておいた参考文献に与えられており，ここではその筋道だけを述べておく．必要になる主要な仮定は $G_\omega{}^+$ が $E\to\infty$ とともに自由 Green 関数 $G_{0\omega}{}^+$ に近づいてゆくという一応自然なものである．ただし（37.19）によって

$$G_{0\omega}{}^+(\mathbf{r}',\mathbf{r})=-\frac{\mu}{2\pi\hbar}|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|^{-1}\exp(ik|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|)$$

このとき k が正の虚数部分をもちながら無限大に近づいてゆくということが明らかに重要な点である．実際にこのようなことになっているということは，以前には束縛状態を

S行列要素あるいは散乱振幅の正虚数k軸の極と同定していたが，ここでは負の実数k軸上の極を束縛状態として同定していることから結論される．要するに，ここで取扱われている切断の入ったE平面のつくる Riemann 面素の全体は $E=\hbar^2k^2/2\mu$ によってk平面の上半分に写像されることになる.[1] こうして次には (39.47) の平面波の振舞いは主として Green 関数中の指数関数によってきまることを証明することができ，その結果 $\iint T(\mathbf{r}', \mathbf{r}, E)d^3r'd^3r$ は $E\to\infty$ とともに零になることになる．同様な議論から (39.50) の積分もその積分の上限を無限大に近づけてゆくと収斂することがわかる．

そこで (39.50) で $E_0=\infty$ にしたものを (39.49) の左辺に代入して $\mathbf{r}'$ と $\mathbf{r}$ について積分すると，(39.48) を使って次の結果が得られる．

$$T(E)=T_B+\sum_n \frac{\Gamma_n}{E-E_n}+\frac{1}{\pi}\int_0^\infty \frac{\mathrm{Im}\, T(E')}{E'-E-i\epsilon}dE' \qquad (39.51)$$

ただし，最後の積分では積分変数 $E'^+=E'+i\epsilon$ を E' で置き換えてあり，つまり $\Gamma_n\equiv\iint\Gamma_n(\mathbf{r}', \mathbf{r})d^3r'd^3r$ とおいてある．(39.44) から $T(E)=-(2\pi\hbar^2/\mu)f(\mathbf{k}, \mathbf{k})$ であること，(39.45) から $T_B=\int V(r)d^3r$ であること，また (20.13) から $\mathrm{Im}\, T(E)=-(\hbar^2k/2\mu)\sigma_{\mathrm{tot}}(E)$ であることを思い出せば，(39.51) は前方散乱振幅に対する分散式になっている．その値を求めるべきもので残っている量は Γ_n だけであるが，これは束縛状態に対応する極 $E=E_n$ における $T(E)$ の留数である．

簡単な例として次のことを注意しておこう．もしも有効領域理論によって記述される一つの束縛状態が存在するとするならば，そのS行列要素 (39.43) は $k=i\kappa$ の極の近くでは近似的に

$$\frac{2i\kappa(\kappa+\alpha)}{(\kappa-\alpha)(k-i\kappa)}$$

で与えられる.[2] このとき，$k^2=-\kappa^2$ にある $T(E)$ のこれに対応する極の近くでは，$T(E)$ の振舞いは主としてこのS行列要素に $(-2\pi\hbar^2/2\mu)(1/2ik)$ をかけたものできまってくる．したがって

$$T(E)\approx-\frac{4\pi\hbar^2}{\mu}\frac{\kappa(\kappa+\alpha)}{(\kappa-\alpha)(k^2+\kappa^2)}$$

---

1) これはEの物理的な面素(シート) *physical sheet* とよばれている；物理的でない面素(シート) *unphysical sheet* はk平面の下半分に写像される．

2) $l=0$ の部分波中にあらわれるが束縛状態には対応しない (39.43) の $k=i\alpha$ での極は，完全な振幅 $T(E)$ 中には存在しないことを証明することができる．

結局 Γ としては次の結果が得られる.

$$\Gamma=-\frac{2\pi\hbar^4}{\mu^2}\frac{\kappa(\kappa+\alpha)}{\kappa-\alpha}=\frac{2\pi\hbar^4}{\mu^2}\frac{\kappa}{1-\kappa r_0} \tag{39.52}$$

ただし，有効域 r_0 は (39.39) から実験的に決めることができる.

39-13 引算された分散式

(39.51) の分散式はいくつかの測定可能な量の間の関係になっており，したがって少なくとも原理的には実験的なテストにかけることができる．つまり，$|T(E)|^2$ はエネルギー E における前方方向での微分断面積に比例しており，$T(B)$ は無限大のエネルギーでの同一の量で，$\operatorname{Im} T(E)$ は全断面積に比例し，さらに Γ は有効域の近似では (39.52) から求めることができるわけである.

しかしながら，高エネルギー領域を含めての実験は簡単に実行可能だとはいえないこと，あるいは (39.51) の積分が利用可能な実験データを使って評価するのに十分なほど急速に収斂してくれないということ，はありうることである．このような場合には，E_0 を任意に選ばれたエネルギーとして $T(E)$ から $T(E_0)$ に対する同様な式を引きさることによって，**引算された分散式** *substracted dispersion relation* を (39.51) から求めることができる．その結果は次のようになる.

$$T(E)=T(E_0)+(E_0-E)\left[\sum_n\frac{\Gamma_n}{(E-E_n)(E_0-E_n)}-\frac{1}{\pi}\int_0^\infty\frac{\operatorname{Im} T(E')}{(E'-E-i\epsilon)(E'-E_0-i\epsilon)}dE'\right] \tag{39.53}$$

$E_0=\infty$ の場合にはこの式が (39.51) になることは明らかである．(39.53) の利点はその被積分関数が分母に E' についての高次のベキをもっているために (39.51) の場合に比べて積分がより急速に収斂してくれることであるが，一方では，$T(E_0)$ がわかっていない限りこの式を利用することができないということがある.

問　　題

1. ψ の任意性を用いて (36.8) の 4 個の方程式を任意の時刻において導け.
2. G_0 に対する (36.9) 式を利用して，(36.8) の最初の方程式が $G_0{}^+$ に対して成立することを直接証明せよ.
3. ハミルトニアンがエルミチアンであるならば時間を含む Schrödinger 方程式の任意の二つの

解の内積は時間について一定であることを証明せよ．この結果を利用して任意の二つの解の直交性が時間について保持されることをまず証明し，次いで（(36.32) におけるように $t'>T_2$ の時刻 t_2 でとか，(36.38) におけるように $t<-T_1$ の時刻 t_1 でとかでなく）任意の時刻に評価することのできるある内積の形での $\langle\beta|S|\alpha\rangle$ に対する表式を求めよ．

4. (35.9) 式と (36.35) 式の右辺の第二項との間にどのような関連があるかを示せ．

5. (37.7) の右辺で $+i\epsilon$ を $-i\epsilon$ で置き換えた式の値を求め，それが $\theta(\tau)-1$ に等しいことを証明せよ．

6. (37.14) をシンボリックに操作してゆくことによって (37.16) を導け．次いでシンボリック関係を使わないで (37.17) を導け．

7. (37.8) 式で $+i\epsilon$ を $-i\epsilon$ で置き換えたもので定義されている $G_{0\omega}^-(\mathbf{r}',\mathbf{r})$ を評価し，かつそれを (37.19) と同様な形で求めよ．また置き換え (37.22) が正当化されることを示せ．

8. (37.31) 式に与えられているような S 行列のユニタリー性を利用して，一般化された光学定理をさらには一つの特別な場合としての光学定理を導け．

9. 大きな距離で r^{-n} のように減少してゆく実ポテンシャルによる散乱の全断面積は，$n>2$ の場合に，かつその場合に限って有限になることを，まず (38.2) の Born 近似の振幅を使って，次には (38.14) の Born 近似の位相のずれを使って証明せよ．

10. 実ポテンシャル $V(r)=-V_0e^{-r/a}$ に対する散乱の微分断面積を Born 近似を使って求めよ．この場合の近似の妥当性の判定条件はどうなるか，またどのような情況のもとでこの条件が満たされるか．

11. Born 近似を使って同一原子のつくる結晶格子による散乱を定性的に論ぜよ．

12. 光学定理と Born 近似振幅 (38.1) を用いて実ポテンシャルに対する全断面積を計算し，その結果を吟味せよ．なお，複素ポテンシャルに対して同様の議論を繰り返して行なえ．

13. 1個の陽子がある原子によって散乱される．この原子は遮蔽 Coulomb ポテンシャルー $(Ze^2/r\cdot e^{-r/a})$ と原子核に起因する短距離の引力をあらわす深さ $-V_0$，半径 R の実の井戸型ポテンシャルとを一緒にしたもので表わすことができるとする．このとき歪曲波 Born 近似を用いて散乱振幅を計算せよ．ただし，核ポテンシャルによって影響をうけるのは $l=0$ の部分波だけであると仮定して，これを正確に取り扱い，Coulomb 場は一次のオーダーまでの扱いにすること．

14. 摂動論を用いて水素原子の $1S\to2P$ 励起過程に対する衝突の微分断面積を計算せよ．全断面積は高い入射エネルギーでは (38.29) の直ぐ次に与えられている表式になることを証明せよ．

15. V_0 および ξ を正であるとして，$r<a$ で $V(r)=-V_0(1+i\xi)$，$r>a$ で $V(r)=0$ で定義されるポテンシャルによる散乱に対する全断面積をアイコナル近似を用いて計算せよ．この結果と第V章問題11で得られた結果とが当然一致すべきであると信じられるような情況を求めて，その際に実際に一致がみられるかどうかを吟味せよ．

16. $l=0$ に対する Jost 関数 $f_0(k)$ を，深さが $-V_0$ で半径が a の実の井戸型引力ポテンシャルについて計算し，それを用いてこのポテンシャル内の任意の束縛状態について，またこのポテンシャルによる散乱の位相のずれについて，できる限りの議論を行なえ．

第X章　同一粒子とスピン

これまでに述べてきた粒子の量子力学的理論には，不完全な点が三つある．まず第一に，水素原子の中の電子と陽子（§16）あるいは非弾性衝突の場合における入射電子と原子内電子（§38）のように，同時に2個あるいはそれ以上の粒子を記述する際には常に，これらの粒子が互いに明瞭に識別できるものとみなしている．第一の例においてはこの仮定は妥当である，すなわち電子と陽子とは全く異なった質量および，荷電をもっているからである．しかし，第二の例においては，入射電子と原子内電子との間には何ら観測にかかるような差異は認められない．したがって，粒子のこの**同一性** *identity* ということが理論形式の中に加味されねばならないのである．理論の第二の欠陥は，これまでのところではスピンが運動の記述にとり入れられていなかったということである．[1] さらに第三の欠陥としては，特殊相対性理論に対して何等の考慮も払われていないことが挙げられる．この理論は，光速度に近い速度で運動している粒子の理論的な記述に大きな影響を与えることが予想される．

この章においてはこれらの欠陥のうち，まず最初の二つを補う方法を示し，典型的ないくつかの例を議論する．なお相対論的効果は第XIII章においてとりあげることにする．

40□同　一　粒　子

同一粒子とは，何らかの固有の性質を利用して識別することができないものである．というのは，もしもそうでないとすると，それらはあらゆる点で同一であるということにならないからである．古典力学においては，個々の粒子に対して明確に定義することのできる軌道が存在する．したがって実験に際して，粒子の一つ一つを連続的に追跡し得

1）§27 を見よ．スピンの存在の最初の発見は電子と関連して，G. E. Uhlenbeck および S. Goudsmit, *Naturwiss.*, **13**, 953 (1925)；*Mature* **117**, 264 (1926). によって行なわれた．

るのである．このことがあるため，その軌道以外の点に関しては全く同一であるような幾つかの粒子を互いに識別することも原理的には可能になるわけである．ところが量子力学においては個々別々の粒子を記述する為の波束が，有限の大きさをもちかつ時間がたてば拡がっていくために，同一の粒子をその位置を理由にして識別することは不可能である．殊にこれらがある程度の相互作用を行なっている場合にはなおさらのことである．その一例としては，1個の原子の中に含まれる電子群が挙げられるが，この場合には前に注意しておいたように，いくつかの運動している波束による記述は完全に破綻する．しかし，異なった原子に属していて，十分隔離されている電子については，識別可能であるものと考えても，さほど悪い近似ではない．この節においては，まず2個あるいはそれ以上の粒子から構成されている体系を量子力学的に取扱う際に，粒子の同一性の効果がどのように入ってくるかを考えることにする．他にスピンの効果が直接あらわれるような効果があるが，これらについては本章の後半において取上げることにする．

40-1　同一性の物理的意義

大抵の量子力学的問題においては，同一粒子が原理的に互いに識別不可能であるということから，古典論においては対応する現象が全然存在しないような効果が，いろいろと起こってくる可能性がある．一例として，ある特定の相互作用を有する2個の同一粒子の間の弾性衝突と，これと同じ型の相互作用を行なっている2個の異なった粒子の間の衝突とを比較してみよう．

古典論的に取扱えば，いずれの場合においても，入射粒子と被衝突粒子とは識別可能であるから二つの実験の結果に原理的な差異はない．しかし，実際的な観点に立てば，こういった粒子の識別は普通第二の実験の場合にのみ行なわれるものと考えることができる．したがって，古典力学の立場に立てば，第一の実験における，微分断面積の測定結果は，第二の実験における，入射粒子と被衝突粒子とのそれぞれに対する断面積の測定結果の和に等しくなるはずである．これに対して第一の実験を量子力学的に考えてみると，この際の2個の同一粒子の位置をそれぞれ十分に局所化しようとすれば，必然的に散乱の過程はみだされてしまうから，その軌道によって，これらの粒子を識別することは望み得ない．したがって，入射粒子と被衝突粒子との間の区別ということも，物理的には無意味であるし，また古典論的な場合に成り立っていた二つの実験の結果の

間の簡単な関係も，この場合には必ずしも成り立つ必要はないわけである．

さて，ここで**同一の** ***identical*** 粒子と言っているのは，およそ考え得るありとあらゆる場合に，これらを互いに置き換えても，物理的状態としては，全く変化をきたさないことを示しているのである．しかし，同一の粒子であっても，互いに識別可能な場合もある．たとえばその波束が，互いに重なり合わない場合がそうである．さらにまた，§41 で詳しく論ずることではあるが，粒子の各々が固有スピン角運動量を持っていて，それがある特定の衝突過程に際して不変に保たれるような場合ももう一つのそのような場合である．すなわちこの場合には，衝突の前後においてある軸方向のスピン成分は変わらないというのであるから，異なったスピン成分を持つような粒子は当然識別可能なわけである．勿論すべてこういった結論はここで建設しようとする理論形式の結果として導かれるものでなければならない．

40-2　対称波動関数と反対称波動関数

n 個の同一粒子に対する Schrödinger 波動方程式は次のように書き下すことができる．

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(1,2,\cdots,n\,;\,t)=H(1,2,\cdots,n)\psi(1,2,\cdots,n\,;\,t) \qquad (40.1)$$

ここで数字は，それぞれの粒子の（位置座標およびスピン座標を一括した）すべての座標を代表しているわけである．また粒子の同一性とはそれらを互いに入れかえても，ハミルトニアンHはもちろん，他のどんなオブザーバブルにも変化がないということであるから，Hはn個の変数に関して対称になっている．

方程式（40.1）には特に興味のある対称性を有する二つの解が存在する．そのn個の変数のうち，任意の一対の粒子に関する二つを交換しても，波動関数が変わらなければ，これを**対称な** ***symmetric*** 波動関数とよび，同様な操作によって，波動関数が符号を変えるときには，これを，**反対称な** ***antisymmetric*** 波動関数とよぶことにする．ここで，波動関数のこのような対称性が，時間的に変化しないということを示しておこう．まず，ψ_S がある時刻 t において対称であるとすれば，$H\psi_S$ もまた対称であって，（40.1）は，$\partial\psi_S/\partial t$ が対称であることを示している．すなわち ψ_S とその時間微分が，時刻 t において対称であるから，無限小時間 dt が経過した後 $\psi_S+(\partial\psi_S/\partial t)dt$ で与えられる時刻 $t+dt$ における ψ_S もまた，対称である．こういった波動関数の階段的な積分は，原理的には任意の長さの時間間隔にわたって続けてゆくことができるから，波動

関数 ψ_S はいつまでたっても，対称のままに止まることになる．同様にして，もし，ある時刻において ψ_A が反対称であれば，$H\psi_A$ したがって，$\partial\psi_A/\partial t$ もまた，反対称であるから，波動方程式を積分してやれば，ψ_A が常に反対称であることがわかる．

以上の証明は2種類またはそれ以上の種類の同一粒子の群が同時に存在していて，Hおよび ψ がその変数として，これらの粒子の座標を含んでいる場合にも同様に成り立つものであって，波動関数の性格が，それぞれの種類に属する同一粒子の座標に関して，対称的であるか，あるいは反対称的であるかが一旦最初に定められておれば，その対称性は終始変わることがないわけである．さてこうしてみれば，自然界に存在する幾種類かの同一粒子の群も，その特定の対称性をそれぞれ保持してゆけるはずであると考えられるが，これはすでに実験によって裏書きされているところである．以上の二つの対称性以外の対称性であっても，やはり対称なハミルトニアンによって時間的に保持されてゆくはずであるが，この種の対称性は自然界に発見されている粒子には対応しないもののようである．[1)]

40-3 対称関数および反対称関数の構成

方程式（40.1）をみたしている一般的な解 ψ は，まだ上述のような特定の対称性をもっていないのであるが，ここでは，これから出発して ψ_S および ψ_A を構成する方法を考えてみよう．まず ψ の変数を任意のやり方で置き換えても，これはやはり（40.1）をみたしている．というのは，このような変数の置換を方程式（40.1）の全体にわたって適用しても，これは単に粒子の番号をつけ直したにすぎないから，方程式自体はそのまま成り立っている；さらにHはその変数に関して対称であるから任意の置換を施しても変わらない．したがって，（40.1）において，ψ の変数のみを置き換えたものが得られるわけである．このようにして一つの解から出発すれば，その n 個の変数の $n!$ 個の置換に対応して，総計 $n!$ 個の解が得られるのである．またこれらの関数のどのような一次結合をとっても，それが，波動方程式（40.1）をみたしていることは明らかである．

さて，これら $n!$ 個の関数の総和をとれば，一つの（規格化されていない）対称波動関数 ψ_S が得られる．このことは任意の一対の粒子をとって交換すれば，この一対

---

1) この点のより立ち入った議論については次のものを見よ：O. W. Greenberg and A. M. L. Messiah, *Phys. Rev.* **138**, B155 (1965); M. D. Girardeau, *Phys. Pev.* **139**, B500 (1965).

の粒子の座標以外に関しては，全く同一であるような一対の成分関数が互いに入れかわるだけで ψ_S は全体として何ら変化を受けないことになるからである．次に規格化されていない反対称波動関数を構成するには，上述の $n!$ 個の解のうちで，もとの一つの解から偶数回の粒子の交換によって得られたものの総和から，奇数回の粒子の交換によって得られたものの総和を減じて置けばよい．任意の一対の粒子の交換に対して不変であるような解から出発したのでは，反対称波動関数を零にならないように構成することはできないことは明らかである．

ハミルトニアンが，時間を含んでいないような事象については，$\psi(1,2,\cdots,n;t)=u(1,2,\cdots,n)e^{-iEt/\hbar}$ という形の定常解を求めることができる．ただし

$$[H(1,2,\cdots,n)-E]u(1,2,\cdots,n)=0$$

である．先の議論によれば，任意の u から，その変数の置換によって導かれるすべての解は，もとの u と縮退していることは明らかである；この種の縮退は**交換縮退** ***exchange degeneracy*** とよばれている．

40-4 対称群[1]

第7章の一般的な議論によれば，ハミルトニアンがその変数の置換に関して対称性をもつということは，その状態関数の変換についてある群が存在することを意味する．再び Schrödinger 流の見方を採用することにして，この変換を（26.1）式との類推で次のように書くことにする．

$$\psi_{\alpha'}[P(1,2,\cdots,n);t]=\psi_\alpha(1,2,\cdots,n;t) \tag{40.2}$$

ただし P は変数 n についてのある置換である．そうすれば（26.2）に対応するものは次のようになる．

$$U_p(P)|\alpha\rangle=\alpha' \quad \text{または}$$

$$U_p(P)\psi_\alpha(1,2,\cdots,n;t)=\psi_{\alpha'}(1,2,\cdots,n;t) \tag{40.3}$$

ただし $U_p(P)$ はユニタリな置換演算子である．（40.2）と（40.3）とを組み合わせれば（26.3）と類似の次の関係が導かれる．：

1) E. P. Wigner, "Group Theory" (Academic, New York, 1959)〔邦訳：前出〕の第13章；A. Messiah, "Quantun Mechanics" (North Holland Publishing Company, Amsterdam, 1962)〔邦訳：前出〕の付録 D. IV.

$$U_p(P)\psi_\alpha(1,2,\cdots,n\,;t)=\psi_\alpha[P^{-1}(1,2,\cdots,n\,;t] \tag{40.4}$$

ただし P^{-1} は $PP^{-1}=P^{-1}P=1$（恒等置換）になるようなPの逆置換である．なお，(26.5)から類推されるようにハミルトニアンが対称であるということは$[U_p(P),H]=0$であること，したがって置換を施した解がその系のある可能な運動を表わしていることに他ならない．

n個の対象の $n!$ 個の置換Pは明らかに $n!$ 個の要素をもつ一つの離散的な群を形成し，それは**対称群** ***symmetric group*** とよばれている．$n!$ 個の演算子 $U_p(P)$ は置換に対して同型になっている．

$n=2$ の場合には恒等置換と互換の2個の置換しか存在しないが，それぞれを1およびPで表わすことにする．2個の対象にPをひきつづいて2回適用してやれば恒等置換になる．したがって，2個の対象に関する対称群は §29 で議論した空間反転群に同型になっている．(40.4) を利用すれば，(29.3) 式に対応するものが（時間による変化を無視すれば）次のものになることは明らかである．

$$U_p(P)u(1,2)=\omega u(2,1) \qquad U_p{}^2(P)u(1,2)=\omega^2u(1,2)$$

$U_p{}^2(P)$ もやはりある状態をそれ自身にもどすことが期待されるものであるから，ω^2は大きさが1の数になる．空間反転の場合の事情とは違って，この場合には ω^2 が何か1以外の数であると仮定すべき理由はない．結局，$\omega=\pm1$ となり，これらのωがそれぞれ対称および反対称の状態を規定することになる．このようにして，$n=2$ の場合の対称群の（階数1の）行列表現が二つ求められる：

$$U_p(1)=1 \quad U_p(P)=1 \quad \text{および} \quad U_p(1)=1 \quad U_p(P)=-1 \tag{40.5}$$

これらの演算子に対応する固有関数は

$$u(1,2)\pm u(2,1) \tag{40.6}$$

である．

nの任意の値に対しても，階数が1の $U_p(P)$ の行列表現は (40.5) に類似の2個だけになることを証明することができる：すなわち，すべてのPに対して $U_p(P)=1$の対称表現と，置換Pをつくる互換の個数が偶数か奇数かにしたがって $U_p(P)=\pm1$ とする反対称表現がそれである．たとえば，$n=3$ とすれば対称および反対称固有関数は

$$[u(1,2,3)+u(2,3,1)+u(3,1,2)]\pm[u(2,1,3)+u(1,3,2)+u(3,2,1)] \tag{40.7}$$

となる．なお，$n=3$ の場合にはこれら以外の $U_p(P)$ の独立な表現が1つだけあることも証明できる．；この表現は6個の 2×2 行列から構成されており，したがって一対の固有関数に作用するわけである．

40-5 同一粒子の識別可能性

幾つかの粒子の座標が互いに重なり合うことがない場合には，これに対して実験を行なっても，その結果は，波動関数の対称性には無関係であることが十分予想される．このことは，それらの粒子が，たとえ互いに同一であったとしても，その位置（あるいはスピン成分）を目安にして，十分識別され得るという事情に対応しているわけである．2個の粒子だけが存在する場合に話を局限して考えれば，このような事情は波動関数 $u(1,2)$ が，座標1がある領域 A の中にあり，座標2が他の領域 B の中にあって，しかも，A と B が互いに共通の領域をもたない場合に限って零と異なる値をもつということを示しているのである．

さて，波動関数 $u(1,2)$ に付随している座標の確率密度は $|u(1,2)|^2$ であり，対称化された波動関数（40.6）に対するこの種の密度は，

$$|u(1,2)\pm u(2,1)|^2=|u(1,2)|^2+|u(2,1)|^2 \pm 2\,\mathrm{Re}\,[u(1,2)u^*(2,1)] \tag{40.8}$$

となる．ただし Re は括弧内の表式の実数部分をとることを意味している．今，1が A の中に無く，2が B の中に無く，かつ，A と B とが重複しない場合には常に，$u(1,2)$ が零となるものと仮定すれば，括弧の項はいたるところで零であって，（40.8）は $|u(1,2)|^2+|u(2,1)|^2$ となる．

このように，（40.6）の対称化された波動関数のいずれに対しても，それに付随する確率密度は $u(1,2)$ および $u(2,1)$ の各々にそれぞれ別々に付随している確率密度の和として表わされることになる．これはまさに，二つの粒子は同一ではないが，実験に際して，それらを互いに識別しようとする試みがなされないような場合に得られる結果に対応しているわけである．したがって，（40.8）の括弧の項によって表わされているような交換縮退した波動関数の間の干渉効果というものは，粒子の座標が互いに重複しない場合にあっては，消滅するものなのである．

40-6 排 他 原 理

考えている体系を構成する幾つかの粒子間に働いている相互作用を無視することによって，有用な零次の近似を得ることができるといった問題が少くない．構成粒子が同一粒子である場合には，近似的な（無摂動系の）ハミルトニアンは，個々の粒子に対する，同一構造のハミルトン関数の和

$$H_0(1, 2, \cdots, n) = H_0'(1) + H_0'(2) + \cdots + H_0'(n) \tag{40.9}$$

として与えられ，同時に，近似的なエネルギー固有関数は，単一粒子に対する H_0' の固有関数の積になる．

$$u(1, 2, \cdots, n) = v_\alpha(1) v_\beta(2) \cdots v_\nu(n)$$
$$E = E_\alpha + E_\beta + \cdots + E_\nu \tag{40.10}$$
$$H_0'(1) v_\alpha(1) = E_\alpha v_\alpha(1), \text{ 等々.}$$

もしこれらの粒子が電子であれば，それに対する反対称波動関数を，(40.10) に与えられた u から構成しなければならない．これを最も簡単に表現するには，これらの v 関数による行列式を作ってやればよい：

$$u_A(1, 2, \cdots n) = \begin{vmatrix} v_\alpha(1) & v_\alpha(2) \cdots v_\alpha(n) \\ v_\beta(1) & v_\beta(2) \cdots v_\beta(n) \\ \cdots & \cdots\ \cdots\ \cdots \\ \cdots & \cdots\ \cdots\ \cdots \\ v_\nu(1) & v_\nu(2) \cdots v_\nu(n) \end{vmatrix} \tag{40.11}$$

(40.11) で与えられる（規格化されていない）波動関数 u_A は明らかに，近似波動方程式 $(H_0 - E) u_A = 0$ に対する反対称解になっている．

(40.11) 式は，v 関数のうちの2個あるいはそれ以上が同一の関数である場合には零になってしまうという，注目すべき性質をもっているが，これは前に述べた，任意の一対の粒子の交換に対して不変であるような解から，反対称波動関数を構成してやることはできないという，一般的結論に対する一つの特例を示しているわけである．したがって，この近似的なハミルトニアン H_0 に対しては，$\alpha, \beta, \ldots \nu$ という状態の内の任意の一つに，1個より多くの電子が存在するような解は存在しないのである．この考えは，化学元素の周期律を説明するための仮説として，Pauli[1] によって最初に要請されたものであって，通常**排他原理** ***exclusion principle*** として知られている．

1) W. Pauli, *Z. f. Physik* **31**, 765 (1925).

40-7 統計力学との関連

(40.10) に与えられているような，対称化されていない零次近似解を使えば，反対称波動関数のみならず，対称波動関数をも構成することができる．まず（規格化されていない）対称波動関数を構成するには，(40.10) の単一粒子の固有関数 $v_\alpha, v_\beta, \cdots, v_\nu$ において，粒子の番号 $1, 2, \cdots, n$ のすべての異なる置換を行なった上で，その和をとってやればよいのであるが，このようにして得られた波動関数は，各状態，$\alpha, \beta\cdots$ にそれぞれ何個の粒子が配分されるかを指定することによって，一意的に決定されるのである．また反対称波動関数に関しても事情は同一であって，各状態に配分される粒子数如何によって，これは一意的に規定されるのである．反対称波動関数あるいは対称波動関数によって記述される2種類の粒子の間での，基本的な統計的差異というのは前者においては，任意の状態を占有し得る粒子数が，0あるいは1に限定されているのに反し，後者においては，かかる制限は存在せず，(0, 1, 2･･･) の任意の個数の粒子が同一状態を占有し得ることである．

互いに相互作用をおよぼし合わない（あるいは，弱い相互作用を行なっている）ような多数の粒子の集団を，これら粒子のとりうる状態というものが以上のような二つの方法によって勘定されるものと考えて取扱うことが，そもそも，**量子統計力学** ***quantum statistical mechanics*** の主題をなしているのである．この際，反対称波動関数によって記述される粒子は**フェルミ－ディラックの統計** ***Fermi-Dirac statistics*** に従うといわれ，**フェルミ粒子** ***fermion*** とよばれている．対称波動関数によって記述される粒子は**アインシュタイン－ボースの統計** ***Einstein-Bose statistics*** に従うといわれ，**ボース粒子** ***bosons*** とよばれている．[1)]

物質粒子の中で，その統計が確定されているものには，フェルミ粒子である電子，陽子，中性子と，ボース粒子である π-中間子がある．[2)] なお光の量子すなわち光子は，それが粒子として取り扱われる限り，Einstein-Bose の統計にしたがうのである．その他に，十分強く結合していて“粒子”とみなすことのできるような粒子集団も対称または反対称な波動数のいずれかによって記述される．

---

1) たとえば K. Huang, “Statistical Mechanics” (Wiley, New York, 1963) の第9章を見よ．

2) たとえば，205頁に引用した文献を見よ．

たとえば，ヘリウム原子核は2個の陽子と2個の中性子と不定数の π-中間子からできていて，これらは強く結合している．もし，核の内部運動の変化を無視できる程度に十分弱い相互作用しかしていない多数のヘリウム核を考えれば，核の重心の運動は近似的に対称な波動関数で記述できることがわかる．一対のヘリウム核の交換は陽子の二対，中性子の二対および π-中間子の数対の交換の結果であると考えることができる．実際の波動関数はすべての陽子および中性子について反対称だから，これら最初の四つの交換の結果近似的波動関数は不変に残る；π-中間子について波動関数は対称であるから，残りの交換によっても何も効果はあらわれない．この議論を拡張して，互いに弱い相互作用をしている“(複合) 粒子”(原子核，原子，あるいは分子) は，それらを構成している電子，陽子，中性子の総数が偶数個のときには Einstein-Bose 統計に従い，奇数個のときには Fermi-Dirac 統計に従うことがわかる．[1]

40-8 同一粒子の衝突

2個の粒子に作用する力がそれらの間の相互作用によるものだけであるときには，全体としての運動は，§16 および §18 で論じたように2個の粒子の重心の運動と粒子の互いに他に対する相対的な運動とに分離することができる．明らかに2個の同一粒子の交換は重心の位置ベクトル [粒子が同じ質量をもつから $\frac{1}{2}(\mathbf{r}_1+\mathbf{r}_2)$ である] には影響しないが，相対的な位置ベクトル $\mathbf{r}(=\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)$ の符号を変える．粒子のスピンを考慮することは次の節まで延ばすことにして，ここでは波動関数の空間部分が対称あるいは反対称であることが，ある粒子のそれと同一な粒子による弾性散乱にどんな効果をおよぼすかを調べることにする．

重心座標系における対称化されていない散乱波動関数の漸近的な形は (18.10) で与えられている．

$$u(\mathbf{r}) \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{ikz}+r^{-1}f(\theta,\phi)e^{ikr} \tag{40.12}$$

ここに r,θ,ϕ は相対的な位置ベクトルの極座標である．ベクトル $-\mathbf{r}$ の極座標は r, $\pi-\theta$, $\phi+\pi$ だから (40.12) から作られる対称および反対称波動関数の漸近形は，次式でそれぞれ上または下の符号をとったものになる．

1) P. Ehrenfest and J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.* **37**, 333 (1931) によれば同じ結論がもっと厳密な取り扱いによって示される．

$$(e^{ikz} \pm e^{-ikz}) + [f(\theta,\phi) \pm f(\pi-\theta,\phi+\pi)]r^{-1}e^{ikr} \tag{40.13}$$

§18 の議論から，重心系における散乱の微分断面積は（40.13）の括弧の項の大きさの平方であることが示されている：すなわち

$$\sigma(\theta,\phi) = |f(\theta,\phi)|^2 + |f(\pi-\theta,\ \phi+\pi)|^2$$
$$\pm 2\,\mathrm{Re}[f(\theta,\phi)f^*(\pi-\theta,\ \phi+\pi)] \tag{40.14}$$

ここで用いられた規格化の正しいことは，同一の粒子が識別可能として，（40.14）式の最後の（干渉）項を除いた古典的極限では，$\sigma(\theta,\phi)$ が当然そうであるように丁度入射粒子の観測による微分断面積（$|f(\theta,\phi)|^2$）と被衝突粒子の微分断面積（$|f(\pi-\theta,\ \phi+\pi)|^2$）の和という正しい結果になっていることに注意すればわかる.

f が ϕ に無関係である通常の場合には，重心系においては単位立体角あたりの散乱は $\theta=90°$ のまわりに対称であることは明らかである．$\gamma=1$ とおいた（18.7）から容易にわかるように，実験室系における（単位立体角あたりでなく）単位角あたりの散乱は

$$\sigma_0(\theta_0)\sin\theta_0 = 4\cos\theta_0\sin\theta_0\{|f(2\theta_0)|^2 + |f(\pi-2\theta_0)|^2$$
$$\pm 2\,\mathrm{Re}[f(2\theta_0)f^*(\pi-2\theta_0)]\}$$

となり，これは $\theta_0=45°$ のまわりに対称になっている.

41□スピン角運動量

次に前節に示された同一粒子の取扱いを補足して粒子のスピン角運動量を含めるようにしなければならない．§27 で示しておいたように，ある粒子のスピン角運動量 $\mathbf{S}$ を $\mathbf{S}^2$ がすべての力学変数と可換であるように定義することができる．つまり，$\mathbf{S}^2$ は厳密に1つの運動の恒量になっており，s を整数または半整数としてそれを $s(s+1)\hbar^2$ で置き換えることができる.

41-1 スピンと統計の関係

§27 で注意しておいたように，電子，陽子，中性子，中性微子および μ 中間子では $s=\frac{1}{2}$ で，π 中間子では $s=0$ である．十分強く結合した粒子の複合体は“粒子”とみなすことができて，その内部運動および成分粒子のスピンの相対的な方向が，それらの複合体

間の相互作用によって著しく影響をうけないかぎり，その全内部角運動量の大きさの一定値によって規定することができる．このことは前節で論じた，複合体のしたがう統計についての事情と全く同様である．

§28 で与えられている角運動量の加法の取扱いを一般化して，素粒子の任意の複合体の全内部角運動量，いわゆる**スピン** *spin* の可能な大きさを計算することができる．もしもその複合体が，各々が $s=\frac{1}{2}$ をもつ n 個の粒子および $s=0$ をもつ個数任意の粒子から構成されており，これら粒子の内部軌道角運動量が無視されるならば，全体の s は n が偶数なら 0 から $\frac{1}{2}n$ までの任意の整数値をとり，n が奇数なら $\frac{1}{2}$ から $\frac{1}{2}n$ までの整数だけ異なる階段的の値をとって変化することができる．一方，全軌道角運動量の量子数は一般に整数または零であることを示すことができる[1]；したがってこれを考慮すれば複合体に対する s の最大値は大きい方にずれるが，s は n が偶数なら零または整数になり，n が奇数なら半整数になるという結論は変更されない．

したがって既知の素粒子および確定したスピンをもつそれらの複合体に対して，スピンと統計の間の一意的な結びつきがあることがわかる．すなわち零あるいは整数のスピンを持つ粒子または複合体は対称な波動関数で記述され，Einstein-Bose の統計にしたがう，そして半整数のスピンをもつ粒子または複合体は反対称な波動関数によって記述され Fermi-Dirac 統計にしたがうわけである．相対論的量子力学に基づけば，スピンおよび統計の両者がまだ確定されていない他の素粒子（π, μ 以外の中間子および中性微子）に対してもこの結びつきが成り立つと信ずべき，ある程度の理論的根拠もあるのである．[2]

41-2 スピン行列と固有関数

§40 の ψ と u の引数として現われる $1, 2, \cdots, n$ という数字の各々に，それぞれの粒子の三つの空間座標と同じくスピン座標をも代表させることにすれば，そこで説明した理論形式にスピンを含ませることができる．スピン座標が空間座標と異なる点は，各空間

1) §27 および §28 で調べたところでは，中心力場の中を動く互いに相互作用をしない粒子に対してこれが正しいことが示されている．そして，その結果は粒子間の相互作用によっても影響されないことになるのである．

2) R. F. Streater and A. S. Wightman, "PCT, Spin and Statistics, and All that," (Benjamin, New York, 1964) の §4-4.

座標は無限個の値をとりうるのに対して，スピン変数はスピン s の粒子（または複合体）に対して $2s+1$ 個の値しかとり得ないということである．空間波動関数が連続無限個の数を指定せねばならない（それは空間座標の一つの連続関数であるというのと同等である）のに反して，単一の粒子に対するスピン波動関数は，$(2s+1)$ 個の数を指定すれば完全に決定されるのである．[1)]

1個の粒子のスピン関数の規格化直交系でよく用いられるものは，(27.26) で与えられる $\mathbf{J}^2$ および J_z の行列の規格化された固有関数を使ってつくられる．これらの固有関数は，ある一箇所をのぞいてはすべて零であるような $(2s+1)$ 行一列の行列である．たとえば $s=\frac{3}{2}$ ならば，4個のスピン固有関数は

$$v(\tfrac{3}{2})=\begin{bmatrix}1\\0\\0\\0\end{bmatrix},\quad v(\tfrac{1}{2})=\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix},\quad v(-\tfrac{1}{2})=\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix},\quad v(-\tfrac{3}{2})=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\1\end{bmatrix} \tag{41.1}$$

であって，それぞれ S_z の固有値 $\frac{3}{2}\hbar$, $\frac{1}{2}\hbar$, $-\frac{1}{2}\hbar$ および $-\frac{3}{2}\hbar$ に対応していることが容易にわかる．規格直交性は，通常の行列の掛算の規則を使って，あるスピン関数のエルミット共軛をその関数自身または他の関数に掛けることによって証明される．

$$[0\ 1\ 0\ 0]\begin{bmatrix}0\\1\\0\\0\end{bmatrix}=1,\qquad [0\ 1\ 0\ 0]\begin{bmatrix}0\\0\\1\\0\end{bmatrix}=0,\qquad \text{等々}$$

対称または反対称な多体の波動関数をスピンを含む対称化されていない解からつくるには，前節にその大略をのべた手つづきにしたがえばよい．対称化されていない解として，同一粒子系の全スピンの大きさの自乗 $(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\cdots+\mathbf{S}_n)^2$ の固有関数と，この全スピンの z 成分 $S_{1z}+S_{2z}+\cdots+S_{nz}$ の固有関数をとるのが便利なことが多い．もしハミルトニアンがスピンと他の角運動量との間の相互作用の項を含まない場合には，これらの量は運動の恒量になっている．その上，このような関数はスピンの相互作用が十分小さくて摂動とみなせるときには零次の波動関数としても有用である．任意の解は全スピンの固有関数の一次結合で表わされるのだから，対称化されていない解をこのように選ぶことによって一般性は失われないのである．

---

1) 空間運動とスピンとが互いに十分強く結びついている場合には，波動関数の空間部分がスピン座標に関係する可能性ができ，その結果 $(2s+1)$ 個の空間の関数が必要になってくる．

41-3 同一粒子の衝突

この段階では，粒子間の相互作用がスピンを含まない場合の2個の同一粒子（または複合体）の衝突に対するスピンの効果を考慮に入れることができる．各粒子は $(2s+1)$ 個のスピン固有関数を持っているから，一対の粒子に対しては全部で $(2s+1)^2$ 個の独立なスピン関数があって，その各々は単一粒子のスピン関数の積になっている．

これらの積からつくった $(2s+1)^2$ 個の一次独立な任意の組み合せをそれらの代りに使うことができる．これらは三つの組にわけて考えるのが便利である．第一の組は，一粒子のスピン関数の積ではあるが粒子が両方とも S_z の値 $m\hbar$ が同一スピンの状態にあるものを集めたものである：すなわち

$$v_1(m)v_2(m), \qquad -s \leqq m \leqq s$$

ここで，下の添字はどの粒子が各状態にいるかを示す；明らかにそのような状態は $(2s+1)$ 個ある．第二の組は次のような積の和を集めたものである．

$$v_1(m')v_2(m'')+v_1(m'')v_2(m'), \qquad m' \neq m''$$

これらの状態は $s(2s+1)$ 個ある．第三の組は同様な積の差を集めたものである．

$$v_1(m')v_2(m'')-v_1(m'')v_2(m'), \qquad m' \neq m'$$

これらの状態もやはり $s(2s+1)$ 個ある．

初めの二つの組は2個の粒子のスピン座標の交換に対して明らかに対称であり，第三の組はそのような交換に対して反対称である．こうして $(2s+1)^2$ 個の状態の全体は $(s+1)(2s+1)$ 個の対称な状態と $s(2s+1)$ 個の反対称な状態にわけることができる．対称なスピン状態と結合する空間状態関数は，s が整数ならば（全体の波動関数を対称にしなければならないから）対称なもの，もし s が半整数ならば（全体の波動関数を反対称にするため）反対称なものでなければならないことになる．同様に，反対称なスピン状態には，$2s$ が偶数なら反対称な空間状態を，$2s$ が奇数なら対称な状態を掛けねばならない．すると，もし衝突の際にすべてのスピン状態がいずれも同等に現われるものと考えてよいならば[1]，$2s$ が偶数のとき多数回の衝突のうちの $(s+1)/(2s+1)$ 部分は (40.13) で上の符号をとった波動関数で記述され，$s/(2s+1)$ 部分は (40.13) の下の符号をとった波動関数で記述されることがわかる．

この結果および $2s$ が奇数のときの同様の結果は (40.14) 式を

1) これは量子統計力学の基本的な要請である；たとえば Huang（前出）を見よ．

$$\sigma(\theta)=|f(\theta)|^2+|f(\pi-\theta)|^2+\frac{(-1)^{2s}}{2s+1}2\,\mathrm{Re}\,[f(\theta)f^*(\pi-\theta)] \qquad (41.2)$$

と書き直すことによってまとめて表わすことができる．ただしfはϕを含まないものと仮定してある．

(41.2)式は，異なったスピン成分をもつ粒子は識別可能であり，その場合(40.14)の干渉項が消えるという以前の注意を使って導くこともできる．このことが起こるのは衝突のうちの $2s/(2s+1)$ の部分である．衝突のうち残りの $1/(2s+1)$ の部分では粒子は同じスピンの成分を持っていて，$2s$ が偶数あるいは奇数にしたがって対称あるいは反対称な空間状態（干渉項の上あるいは下の符号）が使われねばならないことになるからである．

41-4　電子のスピン関数

この章の残りでは，電子のスピン関数 ($s=\frac{1}{2}$) だけを考える．そうすると，スピン行列は (27.26) 式の第一列によって与えられ，それはまた $\mathbf{S}=\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$ と書くこともできる．ただし

$$\sigma_x=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{bmatrix},\qquad \sigma_y=\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix},\qquad \sigma_z=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix} \qquad (41.3)$$

で，これらは Pauli のスピン行列 (27.30) に他ならない．S_z の規格化された固有関数は (41.1) 式との類推によって

$$v(\tfrac{1}{2})=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix}\qquad v(-\tfrac{1}{2})=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix} \qquad (41.4)$$

と書くことができて，それぞれ固有値 $\frac{1}{2}\hbar$, $-\frac{1}{2}\hbar$ を持つ；これらはいずれも $\mathbf{S}^2$ の同じ固有値 $\frac{3}{4}\hbar^2$ の固有関数になっている．

後で異なった電子に対するスピン関数の積を書き下すことがあるだろうから，次のように記号を簡単化しておくのが便利である：

$$v_1(\tfrac{1}{2})v_2(-\tfrac{1}{2})v_3(\tfrac{1}{2})v_4(\tfrac{1}{2})=(+-++),\ \text{等々}$$

つまり，第一の粒子が S_{1z} の固有値 $\frac{1}{2}\hbar$ を持ち，2番目のは S_{2z} の固有値 $-\frac{1}{2}\hbar$ を持つ，等々の状態である．演算子 $\mathbf{S}_1$ は第一の粒子以外のどれのスピン関数にも影響をおよぼさない．

次の演算規則は (41.3) および (41.4) からたやすく得られる：

$$\sigma_x\sigma_y = -\sigma_y\sigma_x = i\sigma_z \quad 等$$

$$\begin{array}{lll} \sigma_x(+) = (-), & \sigma_y(+) = i(-), & \sigma_z(+) = (+) \\ \sigma_x(-) = (+), & \sigma_y(-) = -i(+), & \sigma_z(-) = -(-) \end{array} \tag{41.5}$$

一対の電子に対しては4個の一次独立なスピン関数：(++)，(+−)，(−+)，(−−) がある．一粒子のスピン関数 (41.4) が規格直交になっているから，これらもまた規格直交である．以前に注意しておいたように，これらの関数を $(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2$ および $S_{1z}+S_{2z}$ の固有関数になるような一次結合に組分けし直しておくのが便利なことが多い．この種の組み合せは (28.1) 式に (28.12) の Clebsch-Gordan 係数を代入したものを利用すれば容易に求めることができる．次の四つの一次結合が規格化直交であり，そこに示した固有値を持つことは (41.5) を使かって直接証明することもできる：

$$\begin{array}{ccc} & (\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2 & S_{1z}+S_{2z} \\ (++) & 2\hbar^2 & \hbar \\ 2^{-\frac{1}{2}}[(+-)+(-+)] & 2\hbar^2 & 0 \\ (--) & 2\hbar^2 & -\hbar \\ 2^{-\frac{1}{2}}[(+-)-(-+)] & 0 & 0 \end{array} \tag{41.6}$$

§28 の議論から予想されるように，2粒子のスピン関数 (41.6) の最初の3個をまとめたものはあらゆる点で丁度スピン $s=1$ の単一 '粒子" のように振舞い，スピン関数 (41.6) の最後のものはスピン $s=0$ の単一 "粒子" のようにふるまう[1]が，このことは興味ある結果である．それらは全スピンの大きさの自乗および全スピンの z 成分にそれぞれの場合に対応する正しい固有値をもつだけでなく，三重状態のスピン関数に全スピンの x または y 成分を作用させてやった結果も (27.26) 式の第二列の対応する行列と一致するのである．

41-5 ヘリウム原子

§32 ではヘリウム原子の基底状態を，変分法の見地から考察した．今度はヘリウムの基底および最初の励起状態を，それよりいくらか簡単な §31 の一次の摂動論を使って考察することにする；その際スピンに関係する力は省略するけれども，2個の電子のスピ

1) 初めの三つの状態は**三重状態** *triplet*，最後のは**一重状態** *singlet* とよばれる．前期量子論では三重状態は電子のスピンが平行の状態，一重状態はスピンが逆平行の場合に対応する．

ンに関する対称性の効果は考慮に入れることにする．この問題の無摂動系の固有関数として（$Z=2$ とした）水素原子的な波動関数 u_{nlm} の積を使い，正確なエネルギー準位を求めることよりも，むしろ対称性およびスピンの性質による状態の分類に重点をおくことにする．

分光学的な記法を使えばヘリウムの基底状態は $1s^2$ 状態で，電子はともに水素原子的な状態 u_{100} にある．この空間状態は対称だから，それに掛かるスピン状態は関数（41.6）の最後のものによって与えられる，全スピンが零の反対称な一重状態でなければならないことになる．

ヘリウムの最初の励起状態の空間部分は零次近似では八重に縮退している．分光学的な記法では $1s\ 2s$ および $1s\ 2p$ である．電子の交換を別にすれば，第一の状態は縮退がなく，2番目のは（三つの $2p$ 状態のために）三重に縮退している；交換縮退のため状態の数はこの2倍になる．というのは一方の電子が $1s$ 状態を占めれば，他の電子は $2s$ あるいは $2p$ を占めることができるからである．事柄を簡単にするために，ここでは二重に（交換）縮退している $1s\ 2s$ 状態だけを考える；$1s\ 2p$ 状態は一応別に取り扱えることを示すのは難しい問題ではない（問題7をみよ）．

摂動エネルギーは電子の間の静電斥力による e^2/r_{12} で，無摂動状態は $u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{200}(\mathbf{r}_2)$ と $u_{100}(\mathbf{r}_2)u_{200}(\mathbf{r}_1)$ である．スピンに関係する力を省略しているから，今のところスピンを具体的に考える必要はなく，後で全体の波動関数を反対称にするために適当なスピン関数を掛けることになる．これら二つの状態に対する摂動行列の構造は（31.15）から求められることになり，

$$\begin{bmatrix} J & K \\ K & J \end{bmatrix} \tag{41.7}$$

と書ける．ここに

$$\begin{aligned} J &= \iint u^*_{100}(\mathbf{r}_1)u^*_{200}(\mathbf{r}_2)\frac{e^2}{r_{12}}u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{200}(\mathbf{r}_2)d^3r_1d^3r_2 \\ K &= \iint u^*_{100}(\mathbf{r}_1)u^*_{200}(\mathbf{r}_2)\frac{e^2}{r_{12}}u_{100}(\mathbf{r}_2)u_{200}(\mathbf{r}_1)d^3r_1d^3r_2 \end{aligned} \tag{41.8}$$

で，J は屢々**直接あるいは coulomb エネルギー** *direct* or *coulomb energy* とよばれ，K は**交換エネルギー** *exchange energy* とよばれる．

§31 の対角化のやり方（水素原子の一次 Stark 効果の取り扱いをみよ）を適用

すれば，摂動（41.7）の固有値は $J+K$ と $J-K$ であることがわかる；これらはそれぞれ規格化された固有関数 $2^{-\frac{1}{2}}[u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{200}(\mathbf{r}_2)+u_{100}(\mathbf{r}_2)u_{200}(\mathbf{r}_1)]$ および $2^{-\frac{1}{2}}[u_{100}(\mathbf{r}_1)u_{200}(\mathbf{r}_2)-u_{100}(\mathbf{r}_2)u_{200}(\mathbf{r}_1)]$ に対応する．これらの最初のものは対称な空間関数だから反対称な一重状態のスピン関数を掛けねばならない．同様に反対称な空間関数である第二のものには（41.6）で三重状態を構成している対称なスピン関数の一つを掛けねばならない．Kが正であることがわかるから，スピンの一重状態は三重状態より実際にはかなり高いエネルギーをもつことになる．これはスピンに関係する相互作用によるのではなく，排他原理（反対称な波動関数の使用）によって導入されたスピンと静電的な相互作用の間の結合によるものなのである．物理的な見方からすれば，排他原理があるため2個の電子が平行なスピンをもつ場合には，それらは異なった空間状態をとらざるをえなくなり，したがってお互いに遠ざかろうとする傾向を示し，このことが電子間の静電的斥力を減少させ，結局状態のエネルギーを低下させることになるわけである．

41-6 3個の電子に対するスピン関数

§43 で述べられるはずのヘリウム原子からの交換散乱の取扱いに際しては，3個の電子の全スピンの固有関数が必要になるわけである．これは2個の電子に対して（41.6）式で与えられているものからの類推で求められる．つまり1個の電子（$s=\frac{1}{2}$）を二電子の三重状態関数（$s=1$）および一重状態のスピン関数（$s=0$）とに結びつけることができるという意味で3個の電子を（1+2）個の電子とみなせる．第一の場合には §28 で与えた角運動量の加法についての結果からわかるように，3個の電子に対し $s=\frac{1}{2}$ に対応するものと，$s=\frac{3}{2}$ に対応するものと二つのグループのスピン関数を得るはずである；第二の場合には $s=\frac{1}{2}$ に対応する一群の三電子スピン関数を得ることになる．こうして，一つの**四重の** *quartet* スピン状態（$s=\frac{3}{2}$）のグループと二つの別々の**二重の** *doublet* スピン状態（$s=\frac{1}{2}$）のグループ，あるいは全体で 4+2+2=8 個の個々の三電子スピン状態が予想されるわけである．このことは勿論一電子スピン関数の $2^3=8$ 個の積の一次結合としても表わされるべきものである．

この場合でもやはり，これらの組み合せは（28.1）式から求められるが，今度の場合は（28.13）によって与えられている Clebsch-Gordan 係数を使うことになる；（電子2および3に対するものとして）必要な2電子関数は（41.6）の関数である．結

局次の組み合せが得られる．

$$
\begin{array}{lcc}
 & (\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_3)^2 & S_{1z}+S_{2z}+S_{3z} \\
(+++) & \frac{15}{4}\hbar^2 & \frac{3}{2}\hbar \\
3^{-\frac{1}{2}}[(++-)+(+-+)+(-++)] & \frac{15}{4}\hbar^2 & \frac{1}{2}\hbar \\
3^{-\frac{1}{2}}[(--+)+(-+-)+(+--)] & \frac{15}{4}\hbar^2 & -\frac{1}{2}\hbar \\
(---) & \frac{15}{4}\hbar^2 & -\frac{3}{2}\hbar \\
6^{-\frac{1}{2}}[(++-)+(+-+)-2(-++)] & \frac{3}{4}\hbar^2 & \frac{1}{2}\hbar \\
6^{-\frac{1}{2}}[(--+)+(-+-)-2(+--)] & \frac{3}{4}\hbar^2 & -\frac{1}{2}\hbar \\
2^{-\frac{1}{2}}[(++-)-(+-+)] & \frac{3}{4}\hbar^2 & \frac{1}{2}\hbar \\
2^{-\frac{1}{2}}[(--+)-(-+-)] & \frac{3}{4}\hbar^2 & -\frac{1}{2}\hbar
\end{array}
\tag{41.9}
$$

これらの組み合せの規格直交性と表に示されている固有値は直接検証することができる．最初の四つの（四重）状態は任意の粒子対の交換に対して対称である． 4 個の二重状態を二つの対にわけるやり方は任意であるが，ここでは二重状態の第一の対が粒子 2 と 3 の交換の際に対称であり，第二の二重状態の対は 2 と 3 について反対称であるようにしてある．二重状態は上に書き表わされている通り，粒子の他の対の交換に対しては何の対称性も持たないのである．他の 2 つの対の交換に関する対称性は（40.7）の直ぐ下のところで触れた 2×2 行列によって規定される；これらの行列は m の同一の値をもつ二重スピン状態のどちらかの対に作用するのである（問題 8 を見よ).

42□密度演算子と密度行列

これまでに展開してきた理論はもっぱら単一のケット $|\alpha\rangle$ によって表わされる**純粋量子状態** *pure quantum state* にある系を取り扱うものであった．しかしながら，ある系についての知識が不完全であるということはしばしばおこることである．；たとえば，今考えている系は状態 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle, \cdots$ にあることに対して負にならない確率 $p_\alpha, p_\beta, \cdots$ をもっているという以上には何もいえないということがありうる．この種の不完全さがさして重要なものでないこともありうる．そうした場合には純粋状態の理論で間に合うわけである．；もしもそうでなければ，統計的な取り扱いが必要になる.[1] このやり方は古典的な情況と極めて類似した形で展開することができる．古典論での純粋状態とは位

1) 一般的な綜合報告としては，U. Fano, *Rev. Mod. Phys.* **29**, 74 (1957) を見よ．

相空間内を運動している単一の点によって代表されるもので，この代表点は座標 $q_1\cdots q_f$ およびそれらに対応する正準運動量 $p_1\cdots p_f$ の刻々の瞬間での確定値をもつ．他方，統計的状態とは，時刻 t においてある系を位相空間中の区間 $dq_1\cdots df_n$ 中に見出す確率が $\rho dq_1\cdots dp_f$ になるような一つの負にならない密度関数 $\rho(q_1\cdots q_f, p_1\cdots p_f, t)$ によって記述しうるものである．この古典論的な密度関数の量子論的な対応物が**密度演算子** *density operator* あるいは**密度行列** *density matrin* としてのその表現なのである．それを導入するに先立って，量子論的な純粋状態を記述する別のやり方を議論しておく．

42-1 期待値と射影演算子

ある演算子 Ω のある規格化された離散的純粋状態 $|\alpha\rangle$ に対する期待値は $\langle\alpha|\Omega|\alpha\rangle$ である．これは，任意の完全規格直交系ケット $|i\rangle$ を使って次のように書くことができる．

$$\begin{aligned}\langle\alpha|\Omega|\alpha\rangle&=\langle\alpha|i\rangle\langle i|\Omega|j\rangle\langle j|\alpha\rangle\\&=\langle i|\Omega|j\rangle\langle j|P_\alpha|i\rangle\end{aligned}\tag{42.1}$$

ここで $P_\alpha\equiv|\alpha\rangle\langle\alpha|$ は（23.36）でのように定義された単一の状態 $|\alpha\rangle$ に対する射影演算子である．；（23.33）の約束にしたがって i および j についての一般化された和は省略されている．（42.1）の右辺は $\langle i|\Omega P_\alpha|i\rangle$ あるいは $\langle j|P_\alpha\Omega|j\rangle$ と書くことができる；結局，次の関係が得られるわけである．

$$\langle\alpha|\Omega|\alpha\rangle=\mathrm{tr}\,(\Omega P_\alpha)=\mathrm{tr}\,(P_\alpha\Omega)\tag{42.2}$$

（23.40）に関連して注意しておいたように，P_α はエルミチアンで，しかも

$$P_\alpha^2=P_\alpha,\qquad \mathrm{tr}\,P_\alpha=1\tag{42.3}$$

P_α が，期待値の計算に介入することのない全体にかかる位相因子を除けば，$|\alpha\rangle$ と同一の知識を含むものであることは明らかである．

この節を通じては終始 Schrödinger 流の見方を採用することにして，添字 S を省略しておく．そうすれば，P_α に対する運動方程式は（24.1）および（24.2）から求めることができて，次のようになる．

$$\begin{aligned}i\hbar\frac{d}{dt}P_\alpha&=i\hbar\left(\frac{d}{dt}|\alpha\rangle\right)\langle\alpha|+i\hbar|\alpha\rangle\left(\frac{d}{dt}\langle\alpha|\right)\\&=H|\alpha\rangle\langle\alpha|-|\alpha\rangle\langle\alpha|H=[H,P_\alpha]\end{aligned}\tag{42.4}$$

(42.4) の方程式は符号の点を除けば Heisenberg 型の運動方程式 (24.10) に似ている；けだしこの相似は人を誤らせるものであり，P_α はあくまで Schrödinger 流の見方で見られているのだということを思い出しておかねばならない．実際，Heisenberg 流の見方においては，$|\alpha\rangle$ は，したがってまた P_α は定数である．

42-2 密度演算子

先に注意しておいたように，必ずしも純粋な量子状態にあるわけではない系は，状態 $|\alpha\rangle, |\beta\rangle \cdots$ にあることに対する一組の確率 $p_\alpha, p_\beta \cdots$ によって記述することができ，それらの振幅の間にはでたらめ（ランダム）な位相差をもつ．[1] この種の状態は**統計的状態** *statistical state* とよばれている．そうすれば，純粋状態というものも統計的状態の一つの特別な状態なのであって，その場合には p_α の中の一つが 1 に等しくその他はすべて零になっているわけである．

状態 α としては，必ずしも完全系になっている必要はないとしても互いに規格直交になっているものと仮定しておくのが便利である．つまり，

$$P_\alpha P_\beta = \delta_{\alpha\beta} P_\alpha \qquad \sum_\alpha p_\alpha = 1 \qquad p_\alpha \geq 0 \tag{42.5}$$

ここでこの一組の確率に対応するエルミチアンな演算子 ρ を次式で定義する．

$$\rho \equiv \sum_\alpha p_\alpha P_\alpha = \sum_\alpha |\alpha\rangle p_\alpha \langle\alpha| \tag{42.6}$$

そうすればこれらの確率に対応する Ω の平均としての期待値が次のものになることは (42.2) および (42.5) から導かれる．

$$\langle\Omega\rangle_{\mathrm{av}} \equiv \sum_\alpha p_\alpha \langle\alpha|\Omega|\alpha\rangle = \mathrm{tr}\,(\Omega\rho) = \mathrm{tr}\,(\rho\Omega) \tag{42.7}$$

(42.3) と類似の次の関係の成立することもまた明らかである．

$$\mathrm{tr}\,(\rho) = 1 \qquad \mathrm{tr}\,(\rho^2) = \sum_\alpha p_\alpha{}^2 \leqq 1 \tag{42.8}$$

ただし最後の等号はこの状態が純粋状態である場合に限り成立しうる．

42-3 運動方程式

ここでは Schrödinger 流の見方に立っているわけであるが，この見方での ρ の運動方

---

1) 統計集団の議論および密度演算子と密度行列との統計熱力学に対する関係の議論については，Huang（前出）を見よ．

程式は (42.4) および (42.6) から容易に求められて次のようになる.

$$i\hbar\frac{d\rho}{dt}=[H,\rho] \tag{42.9}$$

このとき p_α が時間について一定であるという事実を利用してある. このことは孤立系に対しては明らかに正しく, Hが外部からの影響を含むようにつくられている限り一般にもやはり正しい. なおこの場合にも, Heisenberg 型の運動方程式と似ているということは, 先の P_α と同様 ρ も Schrödinger 流の見方で見られている以上, 根拠のないことなのである. つまり P_α の場合と同様 ρ は Heisenberg 流の見方では定数になっている ; このことは (42.9) を Schrödinger 流の見方から Heisenberg 流のそれに変換してやればやはり確かめることができる.

$\langle\Omega\rangle_{\rm av}$ という量はそれ自身が実験において観測されるものであることもあるので, その運動方程式もやはり興味がある. ρ に対すると同様 Ω に対しても Schrödinger 流の見方が用いられていることを思い出すならば, (42.7) および (42.9) から結論されるように

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{d}{dt}\langle\Omega\rangle_{\rm av}&=i\hbar\,{\rm tr}\left(\frac{\partial\Omega}{\partial t}\rho\right)+{\rm tr}\,(\Omega[H,\rho]) \\ &={\rm tr}\left[\left(i\hbar\frac{\partial\Omega}{\partial t}+[\Omega,H]\right)\rho\right] \end{aligned} \tag{42.10}$$

となる.

(42.9) に対応する古典論の方程式は **Liouville の定理** ***Liouville's theorem*** として知られている.[1] この定理は (24.22) によって互いに同等な次の二つの式のいずれかの形で書くことができる.

$$\frac{d\rho}{dt}=0 \qquad \frac{\partial\rho}{\partial t}=\{H,\rho\} \tag{42.11}$$

ここで今一度繰り返しておけば, (42.11) を (24.23) と一諸にしたものは, ρ が Heisenberg 流の見方においては一定であるという量子論的結果と一致している.

(42.7) で定義されている $\langle\Omega\rangle_{\rm av}$ の古典論での対応物は

$$\Omega_{\rm av}\equiv\int\cdots\int\Omega(q_1\cdots p_f,t)\rho(q_1\cdots p_f,t)dq_1\cdots dp_f \tag{42.12}$$

---

1) Huang (前出) の p. 76 を見よ.

である．つまり位相空間にわたっての積分が量子論での跡(トレース)の古典論的な対応物になるわけである．この Ω_{av} の時間微分は

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\Omega_{\mathrm{av}}&=\int\cdots\int\left(\frac{\partial\Omega}{\partial t}\rho+\Omega\frac{\partial\rho}{\partial t}\right)dq_1\cdots dp_f\\&=\int\cdots\int\left(\frac{\partial\Omega}{dt}\rho+\Omega\{H,\rho\}\right)dq_1\cdots dp_f\\&=\int\cdots\int\left(\frac{\partial\Omega}{\partial t}+\{\Omega,H\}\right)\rho dq_1\cdots dp_f\end{aligned}\tag{42.13}$$

となる．(42.13) の第一行から第二行に移行する際に (42.11) 式が使われており，第二行から第三行への移行には $q_1\cdots p_f$ に関する部分積分が用いられている．(24.23) を使うと (42.10) と (42.13) とが一致するということは，ここでは Schrödinger 流の見方を用いているということについての以前の注意を思い出してみると驚くべきことのように思われる．しかしながら，$\langle\Omega\rangle_{\mathrm{av}}$ がそれから計算される $\langle\alpha|\Omega|\alpha\rangle$ のような行列要素の数値はどのような見方をとるかには依らないものである以上，この一致は予想されるべきものなのである．

42-4　スピン $\frac{1}{2}$ 粒子に対する射影演算子

以上の理論形式を具体的に説明するのに都合のよいのはスピン $\frac{1}{2}$ 粒子の場合である．というのは，この場合には2個のパラメーターだけによって純粋状態を指定することができるからである．つまり，状態 $|\alpha\rangle$ にあるこの種の粒子は，(41.4) で与えられている $v(\frac{1}{2})$ の一般化である次のような規格化されたスピン波動関数あるいは**スピノール** ***spinor*** によって表わすことができる：

$$|\alpha\rangle=\begin{bmatrix}\alpha_1\\\alpha_2\end{bmatrix}\qquad\langle\alpha|=[\alpha_1{}^*,\alpha_2{}^*]$$
$$\langle\alpha|\alpha\rangle=|\alpha_1|^2+|\alpha_2|^2=1\tag{42.14}$$

2個の複素数 α_1,α_2 に付随している4個のパラメーターは規格化条件と全体に通じる位相は結果に関係しないということから2個にへらされる．$v(\frac{1}{2})$ から $|\alpha\rangle$ への一般化といってもそれは単にケットに回転を作用させることにすぎない．この回転を一方が他方に入れ替わるように選ぶことができる（問題12を見よ)．この状態に対しては射影演算子 P_α は次のような 2×2 行列になる．

$$P_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha| = \begin{bmatrix}\alpha_1 \\ \alpha_2\end{bmatrix}[\alpha_1{}^*\alpha_2{}^*] = \begin{bmatrix}|\alpha_1|^2 & \alpha_1\alpha_2{}^* \\ \alpha_2\alpha_1{}^* & |\alpha_2|^2\end{bmatrix} \tag{42.15}$$

予想通りに $\mathrm{tr}(P_\alpha)=1$ かつ $P_\alpha{}^2=P_\alpha$ であることは容易に確かめられる．

エルミチアンな任意の 2×2 行列は 4 個の一次独立なエルミチアン行列 1，σ_x, σ_y, σ_z の一次結合として書くことができる［(27.32) についての議論を見よ］．この一次結合を

$$P_\alpha = a_0 + \mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{42.16}$$

という形に書く．ただし，4 個の数 a_0, a_x, a_y, a_z は実数である．$\boldsymbol{\sigma}$ の各成分は零の跡をもつから，$\mathrm{tr}\,(P_\alpha)=1$ という条件は $a_0=\frac{1}{2}$ を意味する．また $P_\alpha{}^2=a_0{}^2+2a_0\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}+(\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2$ となり，これは (41.5) の第一式を利用すれば $(\mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma})^2=\mathbf{a}^2$ であることに注意すればさらに簡単にすることができる．その結果，$P_\alpha{}^2=P_\alpha$ という要求は $\mathbf{a}^2=\frac{1}{4}$ であることを意味することになる．結局 P_α を次の形に書くことができる．

$$P_\alpha = \tfrac{1}{2}(1+\boldsymbol{\pi}_\alpha\cdot\boldsymbol{\sigma}) = \tfrac{1}{2}\begin{bmatrix}1+\pi_{\alpha z} & \pi_{\alpha x}-i\pi_{\alpha y} \\ \pi_{\alpha x}+i\pi_{\alpha y} & 1-\pi_{\alpha z}\end{bmatrix} \tag{42.17}$$

この $\boldsymbol{\pi}_\alpha$ は単位長の実ベクトルである．なお，(42.2) と (42.17) とから次の関係が導かれる．

$$\langle\alpha|\boldsymbol{\sigma}|\alpha\rangle = \mathrm{tr}\,(\boldsymbol{\sigma}P_\alpha) = \tfrac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,(\boldsymbol{\sigma}) + \tfrac{1}{2}\,\mathrm{tr}\,|(\boldsymbol{\pi}_\alpha\cdot\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\sigma}] = \boldsymbol{\pi}_\alpha \tag{42.18}$$

(42.15) と (42.17) とを比べてみればわかるように，スピン $\frac{1}{2}$ 粒子の純粋状態は一個の単位ベクトルを使って完全に指定することができる．先に触れた 2 個のパラメーターはこの場合にはこのベクトルの極角変数になる．また (42.18) からわかるように，$\boldsymbol{\pi}_\alpha$ はこのスピン演算子の期待値であるという物理的意義をもっており，その意味でこのベクトルを状態 α に対応する**偏りのベクトル** *polarization vector* とよぶことにする．

42-5 スピン $\frac{1}{2}$ 粒子に対する密度行列

$|\alpha\rangle$ に直交する純粋状態 $|\beta\rangle$ が偏りのベクトル $\boldsymbol{\pi}_\beta=-\boldsymbol{\pi}_\alpha$ をもつことを示すのは難しいことではない（問題13）．このとき，確率 p_α, p_β に対応する密度行列は (42.6) と (42.17) から求めることができて次のようになる：

$$\rho = p_\alpha P_\alpha + p_\beta P_\beta = \tfrac{1}{2}[1+(p_\alpha-p_\beta)\boldsymbol{\pi}_\alpha\cdot\boldsymbol{\sigma}] \tag{42.19}$$

この ρ に対応する $\boldsymbol{\sigma}$ の平均としての期待値は

$$\langle \boldsymbol{\sigma} \rangle_{\mathrm{av}} = \mathrm{tr}\,(\boldsymbol{\sigma}\rho) = (p_\alpha - p_\beta)\boldsymbol{\pi}_\alpha \tag{42.20}$$

となる.

したがって，スピン $\frac{1}{2}$ 粒子のある統計的状態のもつ偏りのベクトルは，その長さが純粋状態に対応する単位長よりも小さくなっていることがわかる.

42-6　スピン s 粒子に対する偏りのベクトル

スピンを s もつ粒子に対するスピン角運動量は行および列が $2s+1$ 個の（27.26）の形の行列によって表現することができる．この場合純粋状態 $|\alpha\rangle$ は $2s+1$ 行の1列行列になり，これは（規格化と全体を通じての位相の点を除けば）$2(2s+1)-2=4s$ 個の実のパラメーターで指定することができる.（42.15）に類似の射影演算子は

$$P_\alpha = |\alpha\rangle\langle\alpha| = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_{2s+1} \end{bmatrix} [\alpha_1{}^* \cdots \alpha^*{}_{2s+1}] \tag{42.21}$$

となる．このようなエルミチアン行列は $(2s+1)^2$ 個の一次独立なエルミチアン行列の一次結合として書き表わすことができる．この種の行列の一つを単位行列にして，残りの $(2s+1)^2-1$ 個の行列を跡が零のものにするのが便利である［（27.33）についての議論を見よ］．そうすれば，後者の行列をスピン s の粒子に対して許される多重極能率の演算子をあらわすように選ぶことができる（§28 の末尾での議論を見よ）．たとえば，$s=\frac{1}{2}$ の場合残りの $2^2-1=3$ 個の行列はスピンあるいは双極子能率の演算子を表わし，$s=1$ の場合には残りの $3^2-1=8$ 個の演算子は双極子および四重極子能率の演算子を表わす.

一般の場合には,（42.16）に類似の次の形におくことができる.

$$P_\alpha = a_0 + \mathbf{a}\cdot\boldsymbol{\sigma} + P_\alpha{}' \tag{42.22}$$

ただし前と同様 a_0, a_x, a_y, a_z は実数である．今度の場合の $\boldsymbol{\sigma}$ は Pauli 行列を高階のスピンに拡張したものであり,（27.26）の行列の適当な組を $s\hbar$ で割ったものになる．残りの $P_\alpha{}'$ はより次数の高い多重極能率演算子のすべてを含むもので,

$$\mathrm{tr}\,(1P_\alpha{}') = \mathrm{tr}\,(\boldsymbol{\sigma}P_\alpha{}') = 0 \tag{42.23}$$

という意味で1および $\boldsymbol{\sigma}$ に直交するように定義されている.（42.23）は4個の行列 $1, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の中の任意の2個の積の跡が零であるという $s=\frac{1}{2}$ の場合の事情の自然な拡

張になっている（なお，問題14を見よ）．(42.22)，(42.23) および問題15から次の関係が導かれる．

$$\mathrm{tr}\,(P_\alpha)=(2s+1)a_0=1 \qquad \boldsymbol{\pi}_\alpha\equiv\mathrm{tr}\,(\boldsymbol{\sigma}P_\alpha)=\frac{(s+1)(2s+1)}{3s}\mathbf{a} \tag{42.24}$$

ただし，$\boldsymbol{\pi}_\alpha$ は偏りのベクトルである．

純粋状態から統計状態への移行は前と同様に行なわれて，偏りのベクトルとしては

$$\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{\mathrm{av}}=\mathrm{tr}\,(\boldsymbol{\sigma}\rho)=\sum_\alpha p_\alpha\boldsymbol{\pi}_\alpha \tag{42.25}$$

が導かれる．ただし和は $2s+1$ 個の規格直交状態についてのものである．

42-7 偏りのベクトルの歳差運動

運動方程式 (42.10) の簡単な1例として，ここで磁場内でのスピン s 粒子の歳差運動を考える．この粒子は次のような磁気能率演算子をもつものと仮定する．

$$\boldsymbol{\mu}=r\mathbf{S}=\gamma s\hbar\boldsymbol{\sigma} \tag{42.26}$$

ただし γ は**回転磁気比** *gyromagnetic ratio* とよばれるものである．このときスピンと磁場 $\mathbf{H}$ との相互作用を記述するハミルトニアンは次のものになる．

$$H=-\boldsymbol{\mu}\cdot\mathbf{H}=-\gamma s\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{H} \tag{42.27}$$

偏りのベクトルの時間的な変化率は $\boldsymbol{\sigma}$ が直接時間を含まないものであるため，(42.10) によって与えられる：

$$\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{\mathrm{av}}=\frac{1}{i\hbar}\mathrm{tr}\,([\boldsymbol{\sigma},H]\rho) \tag{42.28}$$

(27.15) の角運動量演算子の交換関係と (42.26) とを一諸にすれば，

$$\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{\sigma}=\frac{i}{s}\boldsymbol{\sigma} \tag{42.29}$$

となる．したがって，(42.27) と (42.29) とから $\boldsymbol{\sigma}$ の代表的な成分に対して次の関係が得られる．:

$$[\sigma_x,H]=-\gamma sh([\sigma_x,\sigma_y]\,\mathrm{H}_y+[\sigma_x,\sigma_y]\,\mathrm{H}_z)$$
$$=-\gamma i\hbar(\sigma_z\mathrm{H}_y-\sigma_y\,\mathrm{H}_z)=\gamma i\hbar(\boldsymbol{\sigma}\times\mathbf{H})_z$$

そこでこれを (42.28) に代入すれば

$$\frac{d}{dt}\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{\mathrm{av}}=\gamma\,\mathrm{tr}\,[(\boldsymbol{\sigma}\times\mathbf{H})\rho]=\gamma\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle_{\mathrm{av}}\times\mathbf{H} \tag{42.30}$$

となる．(42.30) 式は歳差運動に対する古典論の方程式そのものになっている．このように運動方程式の量子論および古典論での形が一致するということは，Ehrenfest の定理[1] に基づく議論によっても正当化することができる．

43□組み替え衝突

電子の水素原子による弾性的および非弾性的な散乱の計算については §38 で議論したが，その際入射電子と原子内電子との間の交換のことは無視しておいた．電子の交換ということは，衝突系の成分をなす部分系に衝突過程を通じて入れ替えがおこるという**組み替え衝突** *rearrangement collison* の一つの特別の場合になっている．そこでまずこの一般的な場合に対する理論形式をつくり上げてから，つぎにそれを電子—原子散乱に応用することにする．入射電子と原子内電子の同一性とスピンについては，考慮されるべき付加的効果としてそれを導入することにする．具体例として，電子と水素およびヘリウム原子との交換散乱を Born 近似の方法によって議論することにする．

43-1　組み替え衝突のための記法

2個の系 a と b が衝突したとき，元の状態のままの同一の系 a, b (弾性散乱) という結果もあれば異なった状態になった系 a, b (非弾性散乱) という結果もありうる．あるいは，a および b という成分系の間の組み替えによって異なった部分系に最終的には落ちつくこともありうる．そこで $a+b\rightarrow c+d$ という反応を考えることにする．ただし各部分間の同一性とそれのもつスピンは一応考慮しないでおいて後になってその効果を取り入れることにする．このときの全体のハミルトニアンは次の二つのやり方のいずれかによって書きあらわすことができる．

$$H=H_{ab}+H'_{ab}=H_{cd}+H'_{cd} \tag{43.1}$$

ここの H_{ab} は a および b の内部エネルギーと運動エネルギーを，H'_{ab} はそれらの相互作用を記述するもので，H_{cd} および H'_{cd} の定義も同様である．また (43.1) にあらわれているこれらのHはすべてエルミチアンであると仮定しておこう；そうでなければ，H_{ab} あるいは H_{cd} が吸収部分を含むことになり，系 a, b, c, d の中のいくつかに対し

1) F. Bloch, *Phys. Rev.* **70**, 460 (1946).

ては定常状態が存在しないということになることも十分考えられる.

特に注目することになるのは，全エネルギー E に対応しかつ (37.14) の拡張に他ならない次の Lippmann-Schwinger 方程式をみたしている全ハミルトニアンの厳密な解 χ_{ab}^{+} および χ_{cd}^{-} である.：

$$\begin{aligned}\chi_{ab}^{+}&=u_{ab}+(E-H_{ab}+i\epsilon)^{-1}H'_{ab}\chi_{ab}^{+}\\ \chi_{cd}^{-}&=u_{cd}+(E-H_{cd}-i\epsilon)^{-1}H'_{cd}\chi_{cd}^{-}\end{aligned}\tag{43.2}$$

ただし

$$(H_{ab}-E)u_{ab}=0 \qquad (H_{cd}-E)u_{cd}=0 \tag{43.3}$$

43-2 T 行列要素の別の表式

この衝突を記述する T 行列要素を，これまでの計算にしたがって型通りに書き下すことはできない．というのは，今の場合には一つだけの相互作用 V が存在するのではないからである．したがって S 行列要素に対する元の定義式 (36.32) に立ちもどって，(37.1) を利用してそれを次のように定常状態について書き直しておく：

$$\begin{aligned}\langle\beta|(S-1)|\alpha\rangle&=(\phi_\beta,(\psi_\alpha^{+}-\phi_\alpha))_{t'=T_2}\\ &=(u_\beta,(\chi_\alpha^{+}-u_\alpha))e^{(i/\hbar)(E_\beta-E_\alpha)T_2}\end{aligned}\tag{43.4}$$

また，(37.2) の最初の式は，始状態での相互作用は T_2 には切られるから，

$$\langle\beta|(S-1)|\alpha\rangle=-\frac{i}{\hbar}\langle\beta|T|\alpha\rangle\int_{-\infty}^{T_2}g(t)e^{(i/\hbar)(E_\beta-E_\alpha)t}dt \tag{43.5}$$

となる．ここで (37.14) の伝播関数の場合に示しておいたような一般的な手つづきにならって，(43.4) および (43.5) の右辺で E_α を $E_\alpha+i\epsilon$ で置き換える．ただしその際積分は $\lim \epsilon\to 0^{+}$ の意味に理解しておくことにする．このようにすれば，(43.5) の積分はその下限において収斂することになり，したがって $g(t)$ は 1 で置き換えることができる．さらに $E_\alpha=E_\beta$ であることを考えれば，

$$\langle\beta|T|\alpha\rangle=i\epsilon(u_\beta,(\chi_\alpha^{+}-u_\alpha)) \tag{43.6}$$

となる．

この導き方はいささか発見法的なものではあるにしても，前に考察した比較的簡単な場合には (43.6) が (37.2) の第二式に一致することは容易に証明される（問題17を見よ）．ここでの目的のためには，(43.6) 式は相互作用を直接含んでおらず，したが

って相互作用が始状態と終状態で異なっている場合にも適用できるという利点をもっている.

43-3 組み替えに対するT行列要素[1]

ところで, 組み替え衝突にとって都合のよい (43.6) の表式から出発して, それから (37.2) と同様な形の表式を導くことができる. それにはまず, (43.6) の内積の右の因子に作用する $E-H_{cd}+i\epsilon$ と左側の因子に作用するそれの逆随伴演算子を導入する; すなわち

$$\begin{aligned}\langle cd|T|ab\rangle &= i\epsilon(u_{cd}, (\chi_{ab}{}^{+}-u_{ab}))\\ &= i\epsilon((E-H_{cd}-i\epsilon)^{-1}u_{cd}, (E-H_{cd}+i\epsilon)(\chi_{ab}{}^{+}-u_{ab}))\end{aligned}$$

(43.3) の第二式からわかるように, 内積の左側の因子の複素共役はこの場合には $(-i\epsilon)^{-1}u_{cd}$ となる; 内積をつくるのに左側の因子の複素共役をとらねばならないから, この $(-i\epsilon)^{-1}$ という係数は内積の括弧の前の係数 $i\epsilon$ と打ち消し合う. さらに (43.1) を使えば内積の右側の因子において H_{cd} を $H_{ab}+H'_{ab}-H'_{cd}$ で置き換えることができて次のようになる.

$$\begin{aligned}\langle cd|T|ab\rangle &= (u_{cd}, (E-H_{ab}+i\epsilon+H'_{cd}-H'_{ab})(\chi_{ab}{}^{+}-u_{ab}))\\ &= (u_{cd}, (E-H_{ab}+i\epsilon)(\chi_{ab}{}^{+}-u_{ab}))\\ &\quad +(u_{cd}, (H'_{cd}-H'_{ab})\chi_{ab}{}^{+})-(u_{cd}(H'_{cd}-H'_{ab})u_{ab}) \qquad (43.7)\end{aligned}$$

(43.2) の第一式を $\chi_{ab}{}^{+}-u_{ab}$ に代入してみればわかるように, (43.7) の右辺の第1項は $(u_{cd}, H'_{ab}\chi_{ab}{}^{+})$ に等しく, したがってそれは第2項の一部と打ち消し合う. さらに (43.3) を使って

$$\begin{aligned}(u_{cd}, (H'_{cd}-H'_{ab})u_{ab}) &= (u_{cd}, (H_{ab}-H_{cd})u_{ab})\\ &= (u_{cd}, H_{ab}u_{ab})-(H_{cd}u_{cd}, u_{ab})=0 \qquad (43.8)\end{aligned}$$

であるから, 右辺の最後の項は零になる.

結局, (37.2) と同様の構造をもつ次の関係が得られる.

$$\langle cd|T|ab\rangle=(u_{cd}, H'_{cd}\chi_{ab}{}^{+}) \qquad (43.9)$$

始状態と終状態との役割を入れ替えた同等な表式は, (43.6) と類似の形式から出発し

---

1) B. A. Lippmann, *Phys. Rev.* **102**, 264 (1956); E. Gerjuoy, *Ann. Phys.* (*N. Y.*) **5**, 58 (1958).

直すか，あるいは（43.9）を変形してゆくことによって求めることができ，次のようになる：

$$\langle cd|T|ab\rangle=(\chi_{cd}^{-},H'_{ab}u_{ab}) \tag{43.10}$$

（43.9）および（43.10）の方程式は，通常それぞれT行列要素の“**後段**”*post* 形式および“**前段**”*prior* 形式として引用されているものである．というのは最初の形式には終状態における相互作用が含まれており，第二の形式には始状態における相互作用が含まれているからである．これらの二つの方程式に付随して明らかにされていることは，当然予想されることながら始状態または終状態のいずれかにおいて相互作用が存在しない限り，この反応は起こらないということである．

§38 の場合と同様に，この場合の Born 近似とは（43.2）を使って（43.9）で χ_{ab}^{+} を u_{ab} で置き換えるか，（43.10）で χ_{cd}^{-} を u_{cd} で置き換えるか，ということになる．このようなやり方で得られる二つの表式は（43.8）のために等しくなる：

$$\langle cd|T|ab\rangle_B=(u_{cd},H'_{cd}u_{ab})=(u_{cd},H'_{ab}u_{ab}) \tag{43.11}$$

43-4 芯の相互作用が存在する場合

H'_{ab} および H'_{cd} の一部が，衝突している系の一方ともう一方の系中の無限に重い芯との相互作用から生じているという場合には，特に興味ある情況が起こることになる．その1つの例は電子の原子による交換散乱によって与えられている．この例では，原子核は極めて重く，したがってそれは今述べたような無限大の質量をもつ一つの芯と見なすことができる．すでに §38 で説明しておいたように，非交換散乱においては原子内電子の始状態と終状態の波動関数の直交性があるため，入射電子と核との相互作用の結果としては原子の励起（非弾性散乱）はおこりえないのである．大体同じような事情で，交換散乱が生じうるのは入射電子と原子内電子とがそれらの位置を交換するような相互作用のみによるのであって，いずれかの電子と核との相互作用によるのではないことが十分予想される．ただし，このような芯の相互作用のT行列要素への寄与が零であることは（43.9）から（43.11）までの式からは明白な形では何ら示唆されていない．そこ

1）以下の議論は T. B. Day, L. S. Rodberg, G. A. Snow and J. Sucher, *Phys. Rev.* **123**, 1051 (1961) によって与えられた導き方にしたがっている．芯が無限に重いものではない場合への拡張はこの論文の脚注6で論じられている．

でここではむしろ一般的に，この芯の相互作用をどのようにして消去することができるかを示すことにする.[1)]

今考えている反応は図式的には次のように表わすことができる.

$$1+(2, \text{芯})_a \to 2+(1, \text{芯})_b$$

ここで，たとえば最初の括弧は2が芯に束縛されて状態 a にあることを示している．全体のハミルトニアンは次のようになる.

$$H=K_1+K_2+U_1+U_2+V_{12} \tag{43.12}$$

ただし，K_1 と K_2 は1および2に対する運動エネルギーの演算子，U_1 と U_2 は1および2の芯との相互作用，V_{12} は1と2との間の相互作用である．そうすれば（43.1）に関連して定義されていた量は次のようになる：

$$\begin{aligned} H_{ab}&=K_1+K_2+U_2 \qquad H'_{ab}=U_1+V_{12} \\ H_{cd}&=K_1+K_2+U_1 \qquad H'_{cd}=U_2+V_{12} \end{aligned} \tag{43.13}$$

ここで，始めと終りの状態の正確な解を $\chi_{ab}{}^+=\chi_i{}^+$ および $\chi_{cd}{}^-=\chi_f{}^-$ と書き，始めと終りの非摂動解を $u_{ab}=u_\alpha(1)w_a(2)$ および $u_{cd}=w_b(1)u_\beta(2)$ と書くことにする．この w_a と w_b とは芯に束縛された始めと終りの状態の波動関数で，次の方程式を満たしている.

$$\begin{gathered} (K_2+U_2-\epsilon_a)w_a(2)=0 \qquad (K_1+U_1-\epsilon_b)w_b(1)=0 \\ \epsilon_a, \epsilon_b<0 \end{gathered} \tag{43.14}$$

また u_α と u_β は対応する自由粒子の波動関数で次の方程式をみたしている.

$$(K_1-E+\epsilon_a)u_\alpha(1)=0 \qquad (K_2-E+\epsilon_b)u_\beta(2)=0 \tag{43.15}$$

このときの正確な T 行列要素（43.9）の“後段”形式は次のものになる.

$$\langle cd|T|ab\rangle=[w_b u_\beta, (U_2+V_{12})\chi_i{}^+] \tag{43.16}$$

43-5 芯の相互作用項の消去

（43.16）中の U_2 の項を消去することがここでのねらいであるが，このことを果たすための唯一の一般的なやり方は，この行列要素を書きかえていって，U_2 が異なったエネルギーに対応する1の正確な状態間についてのみ現われるようにすることである；そうすれば，この種の状態の直交性と U_2 が1の座標を含まないという事実とを一諸にすればこの項は零になるというわけである．それには，エネルギー ϵ_b に対応する正確な芯

による束縛状態 $w_b(1)$ に付け加えて，$u_\alpha(1)$ に類似に，エネルギー $E-\epsilon_a$ に対応する正確な芯による散乱状態 $\chi_\alpha^+(1)$ というものが必要になってくる．つまり，次の方程式を導入するわけである．：

$$(K_1+U_1-E+\epsilon_a)\chi_\alpha^+(1)=0 \qquad (K_2+U_2-E+\epsilon_b)\chi_\beta^-(2)=0 \qquad (43.17)$$

(43.16) の“後段”型の表式から出発することにすれば必要なのは χ_i^+ に対する (37.14) の形の Lippmann-Schwinger 方程式と χ_β^- に対する (37.16) の形のそれだけである：すなわち

$$\chi_i^+=\chi_\alpha^+(1)w_a(2)+(E-K_1-K_2-U_1-U_2+i\epsilon)^{-1}V_{12}\chi_i^+ \qquad (43.18)$$

$$\chi_\beta^-(2)=u_\beta(2)+(E-\epsilon_b-K_2-U_2-i\epsilon)^{-1}U_2u_\beta(2) \qquad (43.19)$$

(43.19) に $w_b(1)$ をかけて次の形にすることができる：

$$w_b(1)\chi_\beta^-(2)=w_b(1)u_\beta(2)$$
$$+(E-\epsilon_b-K_2-U_2-i\epsilon)^{-1}U_2w_b(1)u_\beta(2) \qquad (43.20)$$

$(E-\epsilon_b-K_2-U_2-i\epsilon)^{-1}U_2$ という演算子は 1 の座標を含んでいないから $w_b(1)$ と可換であるからである．

ここになって芯が無限に重いものであるとの仮定をしなければならなくなる．というのは，すぐ後で (43.20) 中の逆演算子を (43.18) 中の逆演算子の随伴式とすることができるという事実を利用しなければならないからである．(43.20) で ϵ_bw_b を $(K_1+U_1)w_b(1)$ で置き換えるのに (43.14) の第二式を使うことができる場合には，これら 2 つの逆演算子は互いに随伴形になっているが，この置き換えは K_1+U_1 が U_2 と可換である場合に限って正しい．ところで芯が有限の質量のものとしてみよう．そうすれば問題を重心座標系で取り扱わねばならなくなり，全運動エネルギーの演算子をそれぞれで U_2 および U_1 と可換な部分 K_1 と K_2 とに分離することはできないことになる．このことは物理的には，1 の衝撃をうけた有限質量の芯の反跳が 2 を叩き出す可能性があり，したがってその結果芯との相互作用が実際には交換散乱に寄与することになる，という事実に対応している．

芯の質量を無限大とすれば，(43.20) を次式で置き換えることができる．

$$w_b(1)\chi_\beta^-(2)=w_b(1)u_\beta(2)$$
$$+(E-K_1-K_2-U_1-U_2-i\epsilon)^{-1}U_2w_b(1)u_\beta(2) \qquad (43.21)$$

そうすれば，前に得られた関係の中のいくつかを段階的に利用していって (43.16) を

次のように順々に書きかえてゆくことができる；

$$\begin{aligned}\langle cd|T|ab\rangle &= (w_b u_\beta, U_2\chi_i^+) + (w_b\chi_\beta^-, V_{12}\chi_i^+)\\ &\quad -[(E-K_1-K_2-U_1-U_2-i\epsilon)^{-1}U_2 w_b u_\beta, V_{12}\chi_i^+]\\ &= (w_b u_\beta, U_2\chi_i^+) + (w_b\chi_\beta^-, V_{12}\chi_i^+)\\ &\quad -[w_b u_\beta, U_2(E-K_1-K_2-U_1-U_2+i\epsilon)^{-1}V_{12}\chi_i^+]\\ &= (w_b u_\beta, U_2\chi_i^+) + (w_b\chi_\beta^-, V_{12}\chi_i^+)\\ &\qquad\qquad -[w_b u_\beta, U_2(\chi_i^+ - \chi_\alpha^+ w_a)]\\ &= (w_b\chi_b^-, V_{12}\chi_i^+) + (w_b u_\beta, U_2\chi_\alpha^+ w_a)\end{aligned} \tag{43.22}$$

(43.22) の右辺の第2項はこの小節の冒頭で注意しておいたように，$w_b(1)$ と $\chi_\alpha^+(1)$ との直交性のために零になる．結局，正確なT行列要素の“後段”形式に対して次の表式が得られる．

$$\langle cd|T|ab\rangle = [w_b(1)\chi_\beta^-(2), V_{12}\chi_i^+] \tag{43.23}$$

同じようなふうにして，“前段”形式も次のように書くことができる．

$$\langle cd|T|ab\rangle = [\chi_f^-, V_{12}\chi_\alpha^+(1)w_\alpha(2)] \tag{43.24}$$

これらの表式から直ちにわかるように，この過程は1と2の間に相互作用が存在しなければ起こらないのである．

(43.23) と (43.24) とを利用して，V_{12} については1次のオーダーであるが U_1 と U_2 とについては正確なT行列要素に対する歪曲波 Born 近似の式を求めることができる．それには χ_i^+ を (43.18) を使って $\chi_\alpha^+(1)w_a(2)$ で置き換えるか，あるいは χ_f^- を $w_b(1)\chi_\beta^-(2)$ で置き換えればよい．：すなわち

$$\langle cd|T|ab\rangle_{\rm DWBA} = [w_b(1)\chi_\beta^-(2), V_{12}\chi_\alpha^+(1)w_a(2)] \tag{43.25}$$

Born 近似は $\chi_\beta^-(2)$ を (43.19) を使って $u_\beta(2)$ で，$\chi_\alpha^+(1)$ を $u_\alpha(1)$ で置き換えれば求められて，次のようになる．

$$\langle cd|T|ab\rangle_B = [w_b(1)u_\beta(2), V_{12}u_\alpha(1)w_a(2)] \tag{43.26}$$

43-6 電子と水素の交換衝突

同一性とスピンの効果が現われる組み替え衝突の最初の例として電子の水素原子による弾性散乱を考える．このタイプの問題では，同一粒子のあらゆる置換に対する対称化されていない波動関数の漸近形を知らなければならない.[1] そうすれば，§40 および §41

で大筋を述べた方法によって，正しい対称性をもつ波動関数を構成することができるわけである．

2個の電子が存在するのだから，正確な非対称波動関数の r_1 が大きい場合の漸近形と r_2 が大きい場合の漸近形とが必要になる．最初の場合には，漸近形は（38.18）の一般的な形のものになる：

$$\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \xrightarrow[r_1\to\infty]{} C[\exp(i\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}_1) + r_1^{-1}e^{ik_\alpha r_1} f_D(\mathbf{k}_r, \mathbf{k}_\alpha)] w_a(\mathbf{r}_2) + \cdots \tag{43.27}$$

ここで f_D は，入射電子は散乱されるが原子内電子は元の状態のままでいる直接の，つまり非交換の弾性散乱の振幅で，右辺の末尾のドットは（38.18）の級数での他の項を表わしており，原子内電子の励起に対応している．（38.18）のときと同様に，$\mathbf{k}_r$ は $\mathbf{r}_1$ の向きをもつものである．r_2 が大きいときの漸近形は次の形になる．

$$\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \xrightarrow[r_2\to\infty]{} C r_2^{-1} e^{ik_\alpha r_2} f_E(\mathbf{k}_r, \mathbf{k}_\alpha) w_\alpha(\mathbf{r}_1) + \cdots \tag{43.28}$$

ここの f_E は交換弾性散乱の振幅で，末尾のドットはやはり原子の励起をあらわす．なおこの場合の $\mathbf{k}_r$ の向きは $\mathbf{r}_2$ の方向になっている．（43.28）に平面波の状態が見られないのは，r_2 が大きくなると $w_a(\mathbf{r}_2)$ が零になるからである．

§40 および §41 のときのように，対称および反対称な組み合せ $\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \pm \chi_i^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ を取り扱うことにし，r_1 あるいは r_2 を無限大にしたときのそれらの（対称化がなされているため，いずれか一方でよいことになる）漸近形を求めることにしよう．その場合直ちに問題になることは，直接および交換散乱の振幅 f_D および f_E をすでにわかっているそれらに対応する T 行列要素を使って表わすことである．直接散乱に対応する T 行列要素の正確な形は（38.21）から次のようになる．

$$T_D = |C|^2 e^2 \iint \exp(-i\mathbf{k}_\beta \cdot \mathbf{r}_1) w_a^*(\mathbf{r}_2) \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_1}\right) \chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \tag{43.29}$$

同様に，交換散乱に対応する正確な T 行列要素の“後段”形式は（43.23）から求められて，次のようになる．

$$T_E = |C|^2 e^2 \iint w_a^*(\mathbf{r}_1) \chi_\beta^-(\mathbf{r}_2) \frac{1}{r_{12}} \chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) d^3r_1 d^3r_2 \tag{43.30}$$

f_D と T_D との関係は（37.21）あるいは（38.21）からすでにわかっていて

1) J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.* **32**, 361 (1928).

$$f_D = -\frac{m}{2\pi\hbar^2|C|^2}T_D \tag{43.31}$$

である.

f_E と T_E との間にもやはり (43.31) の関係が成立することは十分ありそうなことに思われるが，本当にそうなっているかは自明なことではなく，次の §43-7 でその証明を与えることにしよう．ただし，そのことにとりかかるに先立って，いずれも正確なものである (43.29) と (43.30) の構造を比較してみることは興味がある．T_D に対する表式は，芯との相互作用の項 $-e^2/r_1$ を含み外へ出てゆく電子の終状態としての自由状態 $\exp(i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r}_1)$ を伴っている全相互作用の行列要素になっている．(43.16) を利用すれば T_E をこれと類似の形に書くこともできたわけであった．しかしながら，以下の摂動近似のためには，T_E を電子間相互作用 e^2/r_{12} のみの行列要素として表わしておく方が望ましい．；つまり，そうすれば外へ出て行く電子に対して正確な芯散乱の波動関数 $\chi_\beta^-(\mathbf{r}_2)$ を利用することを通じて電子-核の相互作用が考慮に入れられるのである.

43-7 振幅と行列要素との関係

ここでは，交換散乱の振幅とその行列要素，つまり f_E と T_E とが (43.31) の関係によって結びついていることを証明することにする．相互作用は組み替え衝突の始状態と終状態とで異なっている；したがって T 行列要素に対する (43.6) の表式から出発するのが都合がよい．つまり，それは相互作用を直接含んでいないからである．計算の手つづきを確かめる意味もあって，まず最初に (43.31) の関係をもう一度導いた上で，次にどのようにすればそのやり方を交換散乱の場合に拡張することができるかを示すことにする.

その場合求めたいのは次の積分である.

$$T_D = i\epsilon\iint C^*\exp(-i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r}_1)w_a^*(\mathbf{r}_2) \times[\chi_i^+(\mathbf{r}_1,r_2) - C\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}_1)w_a(\mathbf{r}_2)]d^3r_1d^3r_2 \tag{43.32}$$

ただしこの積分は $\epsilon\to0^+$ の極限として理解されているものとする．この積分には ϵ がかかっているから，ϵ^{-1} に比例する項だけが問題になる．この積分に対する r_1 の有限値からの寄与は有限である；したがって T_D のこの部分は $\epsilon\to0$ の極限では零になって，結局 $\chi_i^+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$ に対する (43.27) の漸近形を使うことができる．異なった状態に

対応するwは直交しており，$\mathbf{r}_2$ について積分する際に零になるから，ドットで表わされている励起の項は除くことができる．

そうすれば，(43.32) の括弧の部分は $w_a(\mathbf{r}_2)$ に比例することになり，したがって $\mathbf{r}_2$ について積分すれば1になる．r_1 の添字を落して T_D を次のように書く．

$$T_D = i\epsilon|C|^2\int r^{-1}\exp(-i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r}+ik_\alpha r)f_D(\mathbf{k}_r,\mathbf{k}_\alpha)d^3r \tag{43.33}$$

(43.6) を導いたときのように，E_α の $E_\alpha+i\epsilon$ による置き換え，あるいはそれと同等な k_α の $k_\alpha+i\epsilon m/\hbar^2k_\alpha$ による置き換えを行なう．$\mathbf{k}_\beta$ の方向を積分のための極軸に選んで，この軸に関する $\mathbf{r}$ あるいは $\mathbf{k}_r$ の極角座標を θ,ϕ であらわすのが便利である．$w=\cos\theta$ とすれば，f_D はこのwとϕのある関数になり，$k_\beta=k_\alpha$ であるからそれを次のように書くことができる．

$$T_D = i\epsilon|C|^2\int r^{-1}\exp\left[-\frac{\epsilon m}{\hbar^2k_\alpha}r+ik_\alpha r(1-w)\right]f_D(w,\phi)d^3r \tag{43.34}$$

一番都合がよいのは，部分積分あるいは (20.14) に関連して議論しておいた定常位相の方法を利用してまず最初にwについての積分を実行してみることである：

$$\int_{-1}^{1}f_D(w,\phi)e^{ik_\alpha r(1-w)}\,dw = \frac{i}{k_\alpha r}[f_D(1,\phi)-f_D(-1,\phi)e^{2ik_\alpha r}] - \frac{i}{k_\alpha r}\int_{-1}^{1}\frac{\partial f_D}{\partial w}e^{ik_\alpha r(1-w)}\,dw \tag{43.35}$$

これを (43.34) に代入すると，(43.35) の右辺の最初の2項からは，rについての積分に対してそれぞれ ϵ^{-1} および $[\epsilon-(2i\hbar^2k_\alpha{}^2/m)]^{-1}$ に比例する寄与が生じる．(43.35) の右辺の積分の項には，さらに部分積分を行なってゆくと分母にrの高次のベキがあらわれるため，rについての積分に対するその寄与として支配的な項は $\ln\epsilon$ のオーダーのものになる．さらに，$f_D(1,\phi)$ は明らかにϕに無関係で，$f_D(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha)$ に等しい．結局 $\epsilon\to0^+$ の極限をとってやれば次の結果が得られる．

$$T_D = -\frac{2\pi\hbar^2|C|^2}{m}f_D(\mathbf{k}_\beta,\mathbf{k}_\alpha) \tag{43.36}$$

これは (43.31) と同じである．

交換散乱に対応するT行列要素も，(43.6) から出発して同じようなやり方で計算することができる．今度の場合に求めたい積分は，(43.32) に代って次のものになる．

$$T_E = i\epsilon \iint w_a^*(\mathbf{r}_1) C^* \exp(-i\mathbf{k}_\beta \cdot \mathbf{r}_2) \times [\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - C \exp(i\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}_1) w_a(\mathbf{r}_2)] d^3r_1 d^3r_2 \qquad (43.37)$$

ここでもやはり積分は $\epsilon \to 0^+$ の極限を意味するものとする．r_2 の有限値からのこの積分に対する寄与は有限になり，したがって T_E の中のこの部分は $\epsilon \to 0$ の極限で零になる．その意味で括弧の中の第2項を無視して，$\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ に対して (43.28) の漸近形を使うことができる；ドットで表わされている励起の項はこの場合もやはり除くことができる．$\mathbf{r}_1$ についての積分の結果は1になり，$\mathbf{r}_2$ の添字を落して T_E を書けば

$$T_E = i\epsilon |C|^2 \int r^{-1} \exp(-i\mathbf{k}_\beta \cdot \mathbf{r} + ik_\alpha r) f_E(\mathbf{k}, \mathbf{k}_\alpha) d^3r$$

となる．この積分は (43.33) と全く同じやり方で求めることができて，その結果は次のようになる．

$$T_E = -\frac{2\pi\hbar^2 |C|^2}{m} f_E(\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\alpha) \qquad (43.38)$$

43-8　同一性とスピンの効果

§41 での同一粒子の衝突の議論のときのように，相互作用はスピンによらないものと仮定することにしよう．そうすれば，2個の電子の同一性とスピンとを考慮に入れるために必要になることといえば，$\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ と適当なスピン関数の積から一つの反対称波動関数をつくることにつきるわけである．スピン関数には (41.5) の後のところで与えられている4個1組のものをとることができる；ただし，(41.6) の4個の対称な組み合せを利用する方がより簡単である．入射粒子のスピンが原子内電子のスピンに対して何らかのきまった関係をもつものとは仮定されてはいない．こうした場合には，スピン関数のこれらの組のいずれか一つを使って，4個1組のスピン状態の各々に関する散乱を計算し，その後にその結果を処々の状態に対し等しい重みで平均すればよい．[1] (41.6) のスピン関数の最初の3個は対称になっており，反対称空間関数 $\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - \chi_i^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ をかけられなければならない．；第4のスピン関数は反対称になっており，これには $\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) + \chi_i^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$ がかけられねばならない．

1)　このことは，(41.2) を導くに当って援用しておいた量子統計力学の基本的要請に他ならない．

電子の座標の一方，たとえば r_1 の大きな値に対する対称化された波動関数の空間部分の漸近形は（43.27）と（43.28）から求められて

$$\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \pm \chi_i^+(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) \xrightarrow[r_1\to\infty]{} C\{\exp(i\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}_1)$$
$$+ r_1^{-1} e^{ik_\alpha r_1}[f_D(\theta) \pm f_E(\theta)]\} w_a(\mathbf{r}_2) + \cdots \qquad (43.39)$$

となる．末尾のドットは原子の励起をあらわすもので，θ は $\mathbf{r}_1$ と $\mathbf{k}_\alpha$ との間の角である．微分断面積は衝突の中の４分の１については上の方の符号で，４分の３については下の方の符号で計算しなければならない．つまり次の結果が得られる．

$$\sigma(\theta) = \tfrac{1}{4}|f_D(\theta) + f_E(\theta)|^2 + \tfrac{3}{4}|f_D(\theta) - f_E(\theta)|^2 \qquad (43.40)$$

（43.40）式は（41.2）式のときのように，スピン波動関数を直接引き合いに出すことなしに，前に注意しておいた異なったスピン成分をもつ粒子は識別可能であるということを利用しても導いてくることができる．つまり，衝突の中の半分をとれば電子は異なったスピン成分をもっており，この衝突断面積は丁度直接散乱と交換散乱の断面積の和 $|f_D(\theta)|^2 + |f_E(\theta)|^2$ になる；残りの半分では電子は識別不可能であり，反対称空間関数が用いられなければならない．結局

$$\sigma(\theta) = \tfrac{1}{2}(|f_D(\theta)|^2 + |f_E(\theta)|^2) + \tfrac{1}{2}|f_D(\theta) - f_E(\theta)|^2$$

という結果が得られ，これは容易にわかるように（43.40）と同一になっている．

43-9 ヘリウムとの交換衝突

ここで電子の，基底状態にあるヘリウム原子による弾性散乱を考えるわけであるが，この場合にもやはり相互作用はスピンに依らないものと仮定しておく．§41 の議論によれば，このヘリウム原子の２個の電子は対称的な空間状態と反対称な（一重項の）スピン状態にある．したがって入射電子１と原子内電子２および３に対応する部分的に対称化された波動関数は，$\mathbf{r}_2$ と $\mathbf{r}_3$ について対称になっている空間関数 $\chi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ と２と３について反対称になっているスピン関数 $v(1,2,3)$ の積として書かれる．（41.9）に３個の電子に対する８個のスピン関数がそれらの２と３についての対称性にしたがって分類されている；明らかに $v(1,2,3)$ はそこで与えられている最後の，二重項をつくっている一対の中の一つでなければならない．

以前の計算を真正直に拡張してやれば次の漸近形が導かれる．

$$\chi_i^+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3)\xrightarrow[r_1\to\infty]{}C[\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}_1)+r_1^{-1}e^{ik_\alpha r_1}f_D(\theta)]w_a(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$$
$$\xrightarrow[r_2\to\infty]{}Cr_2^{-1}e^{ik_\alpha r_2}f_E(\theta)w_a(\mathbf{r}_3,\mathbf{r}_1) \qquad (43.41)$$
$$\xrightarrow[r_3\to\infty]{}Cr_3^{-1}e^{ik_\alpha r_3}f_E(\theta)w_a(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)$$

ただし w_a はヘリウムの基底状態に対応する空間関数で励起状態は無視してある．；θ は漸近形をとっている座標と $\mathbf{k}_\alpha$ との間の角である．直接散乱の振幅 f_D は (43.31) によって T_D と関係づけられるが，この関係はこの場合には次のものになる．

$$T_D=|C|^2e^2\iint\exp(-i\mathbf{k}_\beta\cdot\mathbf{r}_1)w_a{}^*(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3)$$
$$\times\left(\frac{1}{r_{12}}+\frac{1}{r_{13}}-\frac{2}{r_1}\right)\chi_i^+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3)d^3r_1d^3r_2d^3r_3 \quad (43.42)$$

交換散乱の振幅 f_E は明らかに，(43.41) の漸近形の最後の二つに対して同一になり，それは (43.38) によって T_E に関係づけられている．この関係はこの場合次のようになる．

$$T_E=|C|^2e^2\iiint w_a{}^*(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)\chi_\beta{}^{-*}(\mathbf{r}_3)\left(\frac{1}{r_{13}}+\frac{1}{r_{23}}\right)$$
$$\times\chi_i^+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3)d^3r_1d^3r_2d^3r_3 \qquad (43.43)$$

容易にわかるように3個の電子に対する完全に反対称な波動関数は

$$\chi_i^+(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3)v(1,2,3)+\chi_i^+(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3,\mathbf{r}_1)v(2,3,1)+\chi_i^+(\mathbf{r}_3,\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)v(3,1,2) \qquad (43.44)$$

となる．今の場合，電子の座標の中の一つたとえば r_1 が大きく，かつ他の2個の電子がヘリウム原子の基底状態にあるときの (43.44) を計算したいわけである．このことは r_1 についての漸近形をとるとともに，スピン関数も $v(1,2,3)$ 上に射影することを意味している；(43.41) を利用して，その結果は次のようになる．

$$C\{\exp(i\mathbf{k}_\alpha\cdot\mathbf{r}_1)+r_1^{-1}e^{ik_\alpha r_1}[f_D(\theta)+f_E(\theta)v^\dagger(1,2,3)v(2,3,1)$$
$$+f_E(\theta)v^\dagger(1,2,3)v(3,1,2)]\}w_a(\mathbf{r}_2,\mathbf{r}_3)v(1,2,3) \qquad (43.45)$$

$v(1,2,3)$ として (41.9) のスピン関数の最後から2番目のものをとることにすれば，

$$v^\dagger(1,2,3)v(2,3,1)$$
$$=\tfrac{1}{2}[(++-)^\dagger-(+-+)^\dagger][(-++)-(++-)]=-\tfrac{1}{2}$$

となり，同様に $v^\dagger(1,2,3)v(3,1,2)=-\frac{1}{2}$ となる．したがって（43.45）から微分断面積を求めると，

$$\sigma(\theta)=|f_D(\theta)-f_E(\theta)|^2 \tag{43.46}$$

となる．

（41.2）式や（43.40）式と同様，（43.46）式もスピン関数に直接準拠しないで導くことができる．ヘリウム原子がその基底状態にあるためには，2個の原子内電子は逆平行のスピンをもたねばならない（一重状態）から，入射電子のスピンは原子内電子の一つのスピンと同じで，他の一つとは異なっている．弾性散乱においては入射電子と後者の原子内電子とは交換できない．というのは，交換されるときにはその結果は2個の原子内電子はいずれも同一のスピン状態にあることになり，排他原理によってその原子は励起状態をとらざるを得なくなるからである．要するに，入射電子はそれが識別可能であるような電子とのみ交換しうる．したがって直接散乱の振幅と交換散乱の振幅との反対称な組み合せを用いなければならないわけである；このことから（43.46）が得られる．

スピンに関係する相互作用が存在しないとすれば，電子衝撃によるヘリウムの三重状態への励起は入射電子と原子内電子の一方との間の交換によってのみ実現しうることになる．この場合には直接散乱の振幅は存在せず，したがって直接散乱の振幅と交換散乱の振幅との間の干渉は生じないのである．

問　題

1. 3個の対象についての $3!=6$ 個の置換を表現する6個の 2×2 ユニタリー行列の組を求めよ．

2. （40.11）で与えられている反対称波動関数は，関数 $v_\alpha, v_\beta, \cdots v_\nu$ の間に一つの恒等的な一次関係が存在する場合には零になることを証明せよ．

3. ある波動関数 $u(1,2,\cdots n)$ が対称なハミルトニアンの一つの非縮退固有値に対応するエネルギー固有関数になっている場合，この波動関数は対称か反対称のいずれかであることを証明せよ．

4. （41.5）を利用して，（41.6）に与えられているスピン波動関数が，そこに示されている固有値をもつ $(\mathbf{S}_1+\mathbf{S}_2)^2$ および $S_{1z}+S_{2z}$ の固有関数になっていることを確かめよ．さらに，これらのスピン関数に全スピンの x 成分および y 成分を作用させた結果は，（27.20）に与えられている行列の中の適当なものと一致することを示せ．

5. （41.9）に与えられているスピン関数に対して問題 **4** の計算を実行せよ．

6. (41.2) を使って，重心座標系での陽子による陽子の散乱に対する表式を導け．ただし，Coulomb 相互作用は $r=0$ の点にまで達しているものと仮定せよ．なお，この断面積の古典論的極限 ($\hbar \to 0$) を，特に $\theta=90°$ の近傍で論ぜよ．また，任意に小さいがしかし有限な角領域についての平均の散乱を求める場合には，干渉項は消失することを示せ．

7. ヘリウムにおける 1s 2p の配位状態は，§41 の一次のオーダーでのエネルギー準位の計算に関する限りでは 1s 2s の配位状態とは分離して取り扱うことができることを示せ．

8. 問題**1**で求めた行列を (41.9) の同一のm値をもつスピンの二重状態のいずれか一方に作用させて正しい対称性を与えるようにするにはどのようにすればよいかを示せ．

9. もしもヘリウム原子の各電子がスピン角運動量 $\hbar$ をもち，Einstein-Bose の統計に従うものとすれば，ヘリウムの非摂動基底状態の波動関数はどうなるか．

10. 中性リチウム原子に対する非摂動の基底状態波動関数を書け．

11. 座標表示を使って，(42.3) の第2式の正しいこと，すなわち $\mathrm{tr}(P_\alpha)=1$ を確かめよ．

12. 第7章問題**9**の答えを利用して，状態 $v(\frac{1}{2})$ を極角座標が $\theta_\alpha, \phi_\alpha$ の偏りのベクトル π_α をもつ状態 $|\alpha\rangle$ へ回転するユニタリー行列を求めよ．さらに，(42.15) と (42.17) とから計算された P_α が互いに一致することを示せ．

13. スピン $\frac{1}{2}$ 粒子の2個の純粋状態が直交しているならば，これらの状態に対する偏りのベクトルは大きさ等しく方向反対になることを証明せよ．

14. スピン s 粒子に対する $\boldsymbol{\sigma}$ の直交する任意の2個の成分の積の跡(トレース)は零になることを証明せよ．

15. スピン s 粒子に対する $\boldsymbol{\sigma}$ の任意の成分の2乗の跡の値を求めよ．

16. スピン1粒子の任意の純粋状態に対する偏りのベクトルを具体的に計算して，このベクトルの長さは1以下かまたは1に等しいことを示せ．なお，この長さが1に等しくなる状態に課せられる条件を求めよ．

17. $\langle\beta|T|\alpha\rangle$ に対する (43.6) 式が (37.2) の第2式に与えられているものと同一であることを直接証明せよ．

18. (43.9) を変形してゆくやり方で (43.10) を導け．

19. 入射電子と原子内電子が三重項および一重項の組み合わせによってではなくて，(++)，(+−)，(−+)，(−−) という4個のスピン関数によって記述されるものと仮定するならば，(43.40) が得られることを直接計算によって示せ．

20. (43.30) と (43.38) とを利用して水素原子による電子の弾性散乱の振幅に対する Born 近似を求めよ．次に前方方向でのこの振幅の値を求めて，その結果を (38.28) から得られるこれに対応する直接散乱の振幅と比較せよ．

第XI章　輻射の半古典論的取扱い

本書のこれまでのところでは，物質粒子と電磁的な輻射との相互作用は考えに入れていなかった．当然予想されるように，物質粒子についてこれまで述べてきた理論と首尾一貫した取扱いをしようと思えば，Maxwell 方程式に対応するものである電磁場の量子論的な運動方程式を求めることが必要になる．実際，Planck の当初の量子仮設を一般的な理論の枠内にうまくあてはめるということは，このようなやり方によってのみ可能なのである．ただし，そのような意味の輻射の量子論についての基本的な事項の説明は第XIV章にまで持越すとして，この章では，電磁場を古典論で，電磁場が相互作用する粒子は量子力学で取扱うことにする．このような半古典論的な取扱いは，第XIV章で示される場の量子論に比べれば原理的にはより簡単ではあるにしても，理論として不完全なものであり，その結果も全面的に満足すべきものではないということは止むを得ない．実際以下でわかるように，この種の近似的なやり方では，（輻射の吸収および誘導放出の例のように）粒子系に対する外部輻射場の影響の納得のゆくかつ正しい説明を与えることが可能であるが，（たとえば，輻射の自然放出のような）粒子の場に対する影響に対しては適正な取扱いができないのである．ただし，後者のような現象の古典的な取扱いの結果を，十分確定的なものではないにしても，ある種のやり方で，量子論の正しい結果に焼き直すことは可能なのである．最後の §46 では，この種の理論のいくつかの簡単な応用をあげることにする．

44□吸収と誘導輻射

質量 m，荷電 e の粒子がポテンシャル $\mathbf{A}, \phi$ で記述される電磁場内を付加的なポテンシャル・エネルギー V をもって運動する場合の Schrödinger の波動方程式は，(24.39) の方程式の右辺に $V\psi$ の項を付け加えて，次の形で得られる．

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+\frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\cdot\nabla+\frac{ie\hbar}{2mc}(\nabla\cdot\mathbf{A})+\frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2+e\phi+V\right]\psi \tag{44.1}$$

このVについては粒子を束縛している（粒子が電子の場合には本来静電的なものとして考えられる）ポテンシャル・エネルギーと考えておく；$\mathbf{A},\phi$ はある電磁場を表わすものであるが，それはこれらの項が摂動と見なしうる程度に弱いものとする．ここでの目的は，ポテンシャル・エネルギーV中にある粒子の定常状態の間に電磁場によって引きおこされる遷移の確率を計算することにある．そこでまず最初に，電磁場およびその平面波の解の二，三の性質を調べておくことにする．

44-1 Maxwell の方程式

Maxwell の電磁場に対する運動方程式を，Gauss 単位系を使って表わせば次のようになる．

$$\nabla\times\mathbf{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{H}}{\partial t}=0,\qquad \nabla\times\mathbf{H}-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}=\frac{4\pi}{c}\mathbf{J}$$
$$\nabla\mathbf{E}=4\pi\rho,\qquad \nabla\cdot\mathbf{H}=0 \tag{44.2}$$

（44.2）の第二式のダイバージェンスをとったものを，第三式の時間微分と組み合わせると，荷電および電流の密度 $\rho,\mathbf{J}$ に対する連続方程式が得られる．

$$\nabla\cdot\mathbf{J}+\frac{\partial\rho}{\partial t}=0 \tag{44.3}$$

電場および磁場の強さは（24.30）によってポテンシャルを使って次のように表わすことができる．

$$\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}-\nabla\phi,\qquad \mathbf{H}=\nabla\times\mathbf{A} \tag{44.4}$$

この関係から（44.2）の方程式の第一式および第四式は自動的に満たされていることになる．ただし，（44.4）によってポテンシャルは一意的に定義されない．というのは場の強さ $\mathbf{E}$ および $\mathbf{H}$ を正しく与える任意の $\mathbf{A},\phi$ を，場の強さを変えないで次のような新しいポテンシャル $\mathbf{A}',\phi'$ で置き換えることのできることが明らかであるからである．

$$\mathbf{A}'=\mathbf{A}+\nabla\chi,\qquad \phi'=\phi-\frac{1}{c}\frac{\partial\chi}{\partial t} \tag{44.5}$$

ただし，χ は $\mathbf{r}$ および t のある任意関数とする．このように場を変えないでポテンシャ

ルを変化させることは**ゲージ変換** *gauge trans'ormation* とよばれている．波動方程式（44.1）の形がそのままに保たれるべきものであるとすれば，ψ の方もまた

$$\psi'=\psi e^{ie\chi/\hbar c} \tag{44.6}$$

と置き換えられねばならないことは容易に示される（問題3を見よ）．（44.6）および（44.5）はそれぞれ第1種および第2種のゲージ変換とよばれることが多い．

（44.2）の第二および第三式に（44.4）を代入すれば，

$$\begin{aligned}\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}+\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2}+\frac{1}{c}\nabla\frac{\partial\phi}{\partial t}&=\frac{4\pi}{c}\mathbf{J}\\ \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\nabla\cdot\mathbf{A}+\nabla^2\phi&=-4\pi\rho\end{aligned} \tag{44.7}$$

となる．ベクトル $\mathbf{A}$ が直交座標をとって書かれているものとすれば，

$$\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}=\nabla(\nabla\cdot\mathbf{A})-\nabla^2\mathbf{A}$$

と書き直すことができる．ただし右辺の最後の項は $\mathbf{A}$ の各成分のラプラシアンを成分にもつベクトルを意味する．したがって，$\mathbf{A},\phi$ から $\mathbf{A}',\phi'$ へのゲージ変換（44.5）を，新しいポテンシャルが**ローレンツ条件** *Lorentz condition*

$$\nabla\cdot\mathbf{A}'+\frac{1}{c}\frac{\partial\phi'}{\partial t}=0 \tag{44.8}$$

を満たすようにとることによって，（44.7）を簡単化することができることになる．つまりゲージ関数 χ は次の方程式を満たすとする．

$$\nabla^2\chi-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\chi}{\partial t^2}=-\left(\nabla\cdot\mathbf{A}+\frac{1}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)$$

そうすれば（44.7）の方程式は次のようになる．

$$\begin{aligned}\nabla^2\mathbf{A}'-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}'}{\partial t^2}&=-\frac{4\pi}{c}\mathbf{J},\\ \nabla^2\phi'-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\phi'}{\partial t^2}&=-4\pi\rho\end{aligned} \tag{44.9}$$

44-2 平面電磁波

$\mathbf{J}=0,\ \rho=0$ の場合（つまり完全に空虚な空間）には，一般性を失わないですべての $\mathbf{r}$ および t に対して $\nabla\cdot\mathbf{A}'=0,\ \phi'=0$ となるようにゲージを選ぶことが可能であることが証明できる（問題1を見よ）．この場合には横波としての平面波の解が $\mathbf{A}'$ の解とし

て，したがって同時に E および H の解としてもあることを示すことができる．ダッシュの記号を省略してこの場合のポテンシャルに対する式をかけば，

$$\nabla^2\mathbf{A}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2}=0, \qquad \nabla\cdot\mathbf{A}=0 \tag{44.10}$$

となる．伝播ベクトルが $\mathbf{k}$ で，実の偏りのベクトル $|\mathbf{A}_0|$ をもつ，実のポテンシャルを表わす平面波

$$\begin{aligned}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)&=2|\mathbf{A}_0|\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t+\alpha)\\&=\mathbf{A}_0\exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t)]+\text{c. c.}\end{aligned} \tag{44.11}$$

は（44.10）の平面波の解の典型的なものである．ただし，（44.11）の最後の表式で "c. c," は前の項の複素共軛量を表わし，$\mathbf{A}_0$ は $|\mathbf{A}_0|e^{i\alpha}$ で定義される大きさ一定の複素ベクトルである．（44.11）で $\mathbf{k}$ の大きさを k とし，$\omega=kc$ であれば（44.10）の第一式が満たされ，$\mathbf{A}_0$ が $\mathbf{k}$ に垂直であれば第二式が満たされている．

（44.11）のベクトルポテンシャルに伴う電場および磁場は

$$\mathsf{E}=-2k|\mathbf{A}_0|\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t+\alpha)$$

$$\mathsf{H}=-2\mathbf{k}\times|\mathbf{A}_0|\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t+\alpha)$$

となる．**ポインティング・ベクトル** *Poynting vector* $(c/4\pi)\mathsf{E}\times\mathsf{H}$ をつくってみれば，その方向は $\mathbf{k}$ の方向になることは明らかであるが，その大きさは振動の一周期 $2\pi/\omega$ について平均して

$$\frac{\omega^2}{2\pi c}|\mathbf{A}_0|^2 \tag{44.12}$$

となる．ただし，$|\mathbf{A}_0|^2$ は $|\mathbf{A}_0|$ のそれ自身とのスカラー積 $(|\mathbf{A}_0|\cdot|\mathbf{A}_0|)$，別のいい方をすれば $\mathbf{A}_0$ とその複素共軛ベクトルとのスカラー積 $(\mathbf{A}_0\cdot\mathbf{A}_0^*)$ である．（44.12）という量は（44.11）の平面波に伴う輻射場の強度に他ならない．

44-3 摂動論の適用

ここで話を（44.1）の方程式にもどして，ベクトルポテンシャル（44.11）を小さな摂動と見なし，それによって引きおこされる定常状態間の遷移の確率を（44.1）を使って計算することにする．（44.1）の右辺で（$\nabla\cdot\mathbf{A}$ を含む）第三項および（ϕ を含む）第五項は今の場合零である．（44.1）の右辺で，第一項に対する第二項の比および第二項に対する第四項の比は，粒子の運動量を p とすれば，eA/cp のオーダーである．この量

の大きさは問題4で実際上の場合について求められているが，ともかく，摂動近似が許される程度に小さい．結局一次の摂動論の範囲では，$e^2\mathbf{A}^2/2mc^2$ の項は無視することができて，方程式（44.1）は次のように書き直せることになる．

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=(H_0+H')\psi$$

$$H_0=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(\mathbf{r}),\qquad H'=\frac{ie\hbar}{mc}\mathbf{A}\cdot\nabla \tag{44.13}$$

議論の進め方は§35と同様で，まず ψ を無摂動ハミルトニアン H_0 の定常的な固有関数 $u_k(\mathbf{r})$ を使って展開し，その時間を含んだ係数を $a_k(t)$ とする．もしも系は最初には状態 n にあり，摂動は $t=0$ でかけられるものとすると，時刻 t における振幅の第一次近似は（35.11）と同様な次の表式で与えられることになる．

$$a_k^{(1)}(t)=-\frac{\langle k|H'_0|n\rangle}{\hbar}\frac{e^{i(\omega_{kn}-\omega)t}-1}{\omega_{kn}-\omega}-\frac{\langle k|H''^0|n\rangle}{\hbar}\frac{e^{i(\omega_{kn}+\omega)t}-1}{\omega_{kn}+\omega}$$

$$\langle k|H'^0|n\rangle=\frac{ie\hbar}{mc}\int u_k^*(\exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\mathbf{A}_0\cdot\nabla u_n d^3r \tag{44.14}$$

$$\langle k|H''^0|n\rangle=\frac{ie\hbar}{mc}\int u_k^*\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})A_0^*\cdot\nabla u_n d^3r$$

§35での議論と同じく，系を状態 k に見出す確率が問題になりうるのは，（44.14）の二つの項の中のいずれか一方の分母が実質上零である場合に限られる．この二つの項の間の干渉はない：というのは第一項がきいてくるのは $E_k\approx E_n+\hbar\omega$ の場合であり，第二項がきくのは $E_k\approx E_n-\hbar\omega$ の場合であるから．結局，初期状態よりも大体 $\hbar\omega$ 位高いエネルギーをもつある状態 k に系が見出される確率は $|\langle k|H^{0\prime}|n\rangle|^2$ に比例し，大体 $\hbar\omega$ 程度低いエネルギーのある状態 k' に系がある確率は $|\langle k|H''^0|n\rangle|^2$ に比例するわけである．

44-4 遷 移 確 率

§35 での議論から分るように，単位時間当りの遷移確率が時間に無関係なものとして得られるのは，非常に接近して並んでいるかまたは連続的に分布した状態のグループ中の任意の一つとして終状態を選び得るときに限られている．終状態がそのようなグループをつくっていることが必要であるということは，第31図に示されているような確率 $|a_k^{(1)}(t)|^2$ のエネルギーについての変化の仕方に原因がある；つまり第31図で t に比

例しているのは，第31図の曲線より下の面積であって，ある特定の横座標に対する縦座標の値ではないのである．

全く同じやり方で，今度の場合でも入射する輻射が単色（すなわちωの値が確定している）とし，かつ密に並ぶか連続的に分布している終状態群のどれか一つに対して遷移がおこりうる場合には，一定の単位時間当りの遷移確率なるものが求められる．その結果は，(35.14) 式で $\langle k|H'|m\rangle$ の代りに $\langle k|H''^0|n\rangle$ または $\langle k|H'^0|n\rangle$ で置き換えたものになる．しかしながら，しばしば問題になるのは二つの離散的な状態間の遷移確率を計算することである．この場合には，もし入射する輻射が厳密に単色波であるならば，単位時間当りの遷移確率は時間について一定ではなく，ωと

$$|\omega_{kn}|=\frac{|E_k-E_n|}{\hbar}$$

との差によってひどく変動することになる．この場合の処方としては輻射はある拡りの振動数領域にわたっているが，振動数の異なった成分の間には位相関係は存在しないと仮定することである．この仮定の結果，$|\omega_{kn}|$ の近傍で一定の，単位振動数当りの強度によって輻射を規定することができるわけである．[1]

ところで，この場合あるきまった終状態に系がある確率は $|\langle k|H'^0|n\rangle|^2$ または $|\langle k|H''^0|n\rangle|^2$ に比例し，これらはそれぞれ $|\mathbf{A}_0|^2$ に比例しているから，結局この確率は輻射の強度に比例している．小さな角振動数領域 $\Delta\omega$ での強度を $I(\omega)\Delta\omega$ とすれば，(44.12) 式から分るように，その振動数領域を規定しているベクトルポテシャルの振幅 $\mathbf{A}_0$ に対して次のようにおくことができる．

$$|\mathbf{A}_0|^2=\frac{2\pi c}{\omega^2}I(\omega)\Delta\omega \tag{44.15}$$

したがって，時刻 t に系がより高い方のエネルギー状態（$E_k\cong E_n+\hbar\omega$）に残されるような遷移が起こっていた確率は次のようになる．

$$\begin{aligned}|a_k^{(1)}(t)|^2&=\sum_\omega\frac{4|\langle k|H'^0|n\rangle|^2\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{kn}-\omega)t}{\hbar^2(\omega_{kn}-\omega)^2}\\&=\sum_\omega\frac{8\pi e^2}{m^2c\omega^2}I(\omega)\Delta\omega\times\end{aligned}$$

1) 強度が $|\omega_{kn}|$ の近傍で一定でない場合の議論については次のものを見よ；W. Heitler, "The Quantum Theory of Radiation" 3rd ed. (Oxford, New York, 1954) ［邦訳：沢田克郎訳「輻射の量子論」吉岡書店］第20節．

$$\times\left|\int u_k^* \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\nabla_A u_n d^3r\right|^2 \frac{\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{kn}-\omega)t}{(\omega_{kn}-\omega)^2} \quad (44.16)$$

ただし，∇_A はグラディエント演算子の偏りのベクトル $\mathbf{A}_0$ の方向の成分である．振動数の異なる輻射成分の間には位相関係が存在しないのだから，種々の振動数領域からの確率は加法的に寄与することになる．

(44.16) での各振動数領域 $\Delta\omega$ は無限に小さくすることができ，その結果，和は積分で置き換えられる．時間を含む因子は $\omega=\omega_{kn}$ で鋭い極大をもっているから，ω を含む他の項は積分の外に出すことができ，一方 ω についての積分の上下限は $\pm\infty$ にまで拡げられる．この手続きは，(35.13) 式から (35.14) 式に移る際に行なわれたものと同様のものである．結局，上向きの遷移に対する単位時間当りの遷移確率は次のようになる．

$$\frac{1}{t}|a_k^{(1)}(t)|^2=\frac{8\pi e^2}{m^2c\omega^2_{kn}}I(\omega_{kn})\left|\int u_k^*(\exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\nabla_A u_n d^3r\right|^2$$

$$\times\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\sin^2\frac{1}{2}(\omega_{kn}-\omega)t}{t(\omega_{kn}-\omega)^2}\omega d$$

$$=\frac{4\pi^2e^2}{m^2c\omega^2_{kn}}I(\omega_{nk})\left|\int u_k^*(\exp i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\nabla_A u_n d^3r\right|^2 \quad (44.17)$$

ただし，$\mathbf{k}$ の大きさは ω_{kn}/c である．下向きの遷移 ($E_{k'}\approx E_n-\hbar\omega$) に対する単位時間当りの確率に対しても (44.17) 式とよく似た次の表式が得られる．

$$\frac{4\pi^2e^2}{m^2c\omega_{nk'}{}^2}I(\omega_{nk'})\left|\int u_{k'}^*\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\nabla_A u_n d^3r\right|^2 \quad (44.18)$$

今度の場合には $\mathbf{k}$ の大きさは $\omega_{nk'}/c$ である．

44-5 輻射の吸収，放出による解釈

(44.17) および (44.18) の表式はある古典的な輻射場の影響のもとでの定常状態間の遷移に対する単位時間当りの確率を与えている．ところで，これらの表式を電磁輻射の量子の吸収，放出という言い方を使って解釈することができる．それには，そのような量子が存在し輻射場のエネルギー単位になっていることおよびエネルギーは輻射場と粒子との間で保存されていることを仮定する必要がある．角振動数 ω_{kn} の輻射の影響をうけて，この粒子は上向きの遷移では E_k-E_n だけのエネルギーを得る．この輻射のエネルギー量子は $\hbar\omega_{kn}=E_k-E_n$ である．したがって粒子の上向きの遷移には輻射場

からの一個の量子の**吸収** ***absorption*** が伴っているものと考えることができる．

同様な考え方で，粒子の下向きの遷移には輻射場の振動数に応じたエネルギーをもった一個の量子の放出が対応させられる．(44.18) 式にしたがえば，この放出の確率は存在する輻射の強度に比例する．その意味で，この過程は**誘導放出** ***induced emission*** という名でよばれている．

(44.18) の遷移は (44.17) で表わされている遷移に対して逆になっている．この関係を利用して (44.18) を書き直しておくと便利なことがある．(44.17) は低い初期状態 n から上の終状態 k への遷移を記述している；一方 (44.18) で n を k で，k' を n で置き換えて上にある初期状態 k から下の終状態 n への遷移を記述するようにすることができる．このようにすると (44.18) は

$$\frac{4\pi^2e^2}{m^2c\omega_{kn}{}^2}I(\omega_{kn})\left|\int u_n{}^*\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\nabla_A u_k d^3r\right|^2 \tag{44.19}$$

となる．ところで (44.19) の積分は (44.17) の積分の複素共軛の符号をかえたものに他ならないことが次のようにしてわかる．部分積分を使うか，または (23.21) の公式を使えば，(44.19) の積分は

$$-\int u_k\nabla_A[u_n{}^*\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]d^3r$$

に等しいことがわかる．[1] ところで偏りのベクトル $\mathbf{A}_0$ の方向のグラディエントの成分だけしか現われず，かつこの方向は $\mathbf{k}$ に垂直であることから，∇_A という演算子は $\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ には影響を与えない．したがって (44.19) の積分は

$$-\int u_k\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\nabla_A u_n{}^*d^3r$$

に等しく，その絶対値の自乗は (44.17) の積分の絶対値の自乗に等しくなる．

(44.17) と (44.19) は同じなのだから，結局同一の輻射場の影響の下では任意の一対の状態間の遷移と逆向き遷移の確率とは相等しいことになる．

45-6　電気的双極子遷移

実用上の興味のある場合では殆どいつでも，輻射の波長は粒子の運動を記述する波動関数の一次元的な拡りに比べてはるかに大きい．このことは次のことを意味する．すなわ

---

1)　(23.21) の公式を使う際，エルミチアンなのは演算子 $i\nabla$ であって，∇ でないことに気をつけねばならない．

ち，u_n および u_k が十分大きくて積分にかなりきいている限りでは，(44.17) の積分の指数関数に現われる $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ という量は1に比べて小さい．したがって，$\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ を1で置き換えても十分よい近似になっている．

このようにして簡単化された積分は，結局は次のような粒子の運動量の行列要素として表わすことができる．

$$\int u_k{}^*\nabla_A u_n d^3r=\frac{i}{\hbar}\int u_k{}^*p_A u_n d^3r=\frac{i}{\hbar}\langle k|p_A|n\rangle$$

ただし，p_A は入射輻射波の偏り方向にとった粒子の運動量 $\mathbf{p}$ の成分である．§24 の行列形式の理論からわかるように，摂動をうけていない粒子の運動量の行列は $\mathbf{p}=m(d\mathbf{r}/dt)$ で与えられる．したがって (24.16) 式から

$$\frac{1}{m}\langle k|\mathbf{p}|n\rangle=\frac{d}{dt}\langle k|\mathbf{r}|n\rangle=i\omega_{kn}\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$$

となる．この近似では，(44.17) 式の積分は結局次のようになる．

$$\int u_k{}^*\nabla_A u_n d^3r=-\frac{m}{\hbar}\omega_{kn}\int u_k{}^*r_A u_n d^3r \tag{44.20}$$

ただし，r_A は $\mathbf{r}$ の偏り方向への成分である．(44.20) の関係は勿論，行列形式によらなくても導き出すことができる (問題5を見よ)．

(44.20) を (44.17) に代入することによってその確率が計算される遷移は**電気的双極子遷移** *electric-dipole transition* とよばれている．というのは，粒子の電気的な双極子能率 $e\mathbf{r}$ の行列要素だけが含まれているからである．[1] 要するに，双極子近似では吸収および放出に対する単位時間当りの遷移確率は次のようになる．

$$\frac{4\pi^2e^2}{\hbar^2c}I(\omega_{kn})|\langle k|r_A|n\rangle|^2 \tag{44.21}$$

x, y, z の kn 行列要素を成分にもつベクトルを $\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$ と書くことにし，かつ $\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$ とその複素共軛ベクトルとのスカラー積を

$$|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2=\langle k|\mathbf{r}|n\rangle\cdot\langle k|\mathbf{r}|n\rangle^* \tag{44.22}$$

と置くことにすると便利である．このような記法を用いる理由は次の点にある．つまり $\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$ というベクトル自身は空間でいろいろな方向をとるが，それ以外の点では

---

1) $e\mathbf{r}$ なる量は任意にとられた原点に関する荷電 e の粒子の電気的双極子能率に他ならない；(原点をずらすことに対応して) $\mathbf{r}$ にある定数ベクトルをつけ加えても，u_k と u_n が直交している以上，(44.20) の行列要素は変化しない．

$|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$ が同一になるような状態 k および n の一対がいくつかあるのが普通である.[1] そのような場合 $\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$ と入射輻射波の偏り方向との角を Θ とすれば (44.21) の $|\langle k|r_A|n\rangle|^2$ の代りに $|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2\cos^2\Theta$ で置き換えて, Θ について平均をとることができる. そのような状態の対に対する (44.21) の平均は結局次のようになる.

$$\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2c}I(\omega_{kn})|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 \tag{44.23}$$

44-7　禁止遷移

特定の状態 k および n に対しては双極子の行列要素 $\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$ が零であることが起こりうる. このような場合には (44.17) の積分で $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ を 1 で近似的に置き換えることは正しいとはいえない. 指数関数をベキ級数で展開すれば

$$\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})=1+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+\frac{1}{2!}(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})^2+\cdots$$

と書くことができるが, またこれは $\mathbf{k}$ と $\mathbf{r}$ との間の角を θ として (19.9) のような球関数を使っても展開できて,

$$\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})=j_0(kr)+3ij_1(kr)P_1(\cos\theta)-5j_2(kr)P_2(\cos\theta)+\cdots$$

となる. 普通の場合のように波動関数 u_k および u_n を球関数を使って表わすことができる場合には, 最初のベキ級数より第二の展開の方が便利である.

いずれの展開の場合でも, $kr\ll1$ とすれば n 番目の項の中で一番効いてくる因子は $(kr)^n$ に比例している [(15.7) の第一式を見よ]. したがってもしも双極子行列要素は零になるが各級数の次の項は零でない場合には, 粒子の波動関数の一次元的な拡りを a のオーダーとすれば遷移の行列要素は大きさ ka のオーダーの因子だけ小さくなってくる. この種のタイプの遷移は**禁止遷移** *forbidden transition* とよばれている. というのはこの過程の確率には双極子遷移あるいは**許容遷移** *allowed transition* の確率に対比して $(ka)^2$ の因子がかかってきており, 通常 $ka\ll1$ だからである. 級数の各項を逐次に電気的双極子, 四重極子等による遷移として解釈することができるが, 各項は逐次に ka の高いベキを含んでいる.

---

1) たとえば球対称なポテンシャル $V(r)$ 中を運動している粒子の場合には, 状態 k は $l=0$ をとることができるが, 状態 n としては $l=1$ でかつ磁気量子数 m に対しては (0, ±1) の 3 つの値のものをとることができる.

もしも状態 u_k および u_n の双方ともが球対称であれば，積分 $\int u_k^* \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\nabla_A u_n d^3r$ は恒等的に零になる．このことは x 軸が偏りの方向にむいているように直交座標を選んでおいて積分を行なって示すことができる．つまり，そのようにすれば $\nabla_A u_n$ は x の奇関数であるが u_k は x の偶関数となり，さらにベクトル $\mathbf{k}$ は偏りの方向に垂直，したがって yz- 平面にあるから $\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})=e^{i(k_y y+k_z z)}$ となり，これは x の偶関数である．結局被積分関数は x についての奇関数で (44.17) の積分は零になることになる．この種の状態間の遷移は (44.17) による一次近似での確率が完全に零であるという意味で**強く禁止されている** *strictly forbidden* といわれている．この場合でも (44.13) 式の H' の高次の摂動によって遷移が引きおこされる可能性はある；ただし，そのような計算の際には，前に無視されていた $e^2\mathbf{A}^2/2mc^2$ の項を H' の中に含ませておかねばならない．しかしながら，その種の高次の遷移は一個以上の量子を含んでおり，したがってやりとりされる量子的なエネルギーは粒子の無摂動状態 k および n のエネルギー差に等しいといった単なる吸収または放出の過程にはなっていないことが量子電磁力学を使えば示すことができる．

45□自　然　放　出

荷電をもった古典的振動子は，輻射場と振動子との間の位相関係に応じて輻射場からエネルギーを吸収したりまたは場にエネルギーを与えたりすることができる．この種の効果は前節の吸収および誘導放出に類似のものである．また一方，古典的な振動子は外部輻射場が存在するかしないかに拘らず自発的に輻射を放出する．この節では外場がない場合に荷電-電流分布の古典的な振動による電磁的輻射を計算し，その公式を量子論的な行列要素を使って書き直して輻射の**自然放出** *spontaneous emission* の確率を求めることにする．この書き直しはいささか任意性を含むものではあるので，ついで空洞中の熱輻射の分布に対する Planck の表式との比較によってその結果を検証しておく．

45-1　古典的な輻射場

荷電および電流の分布は，電流密度 $\mathbf{J}$ が連続方程式 (44.3) によって荷電密度 ρ を決定するから，$\mathbf{J}$ によって完全に規定することができる．同様に荷電および電流から十分離

れた空虚な空間での電磁場は $\mathbf{E}$ および $\mathbf{H}$ の間の（44.2）の関係によって，$\mathbf{E}$ または $\mathbf{H}$ のいずれか一方によって完全に規定される．ところで，（44.9）の方程式の第一のものの curl をとれば $\mathbf{H}$ に対する一つの波動方程式が容易に得られる．

$$\nabla^2\mathbf{H}-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\mathbf{H}=-\frac{4\pi}{c}\nabla\times\mathbf{J} \tag{45.1}$$

つまり $\mathbf{H}$ は $\mathbf{J}$ だけを使って求めることができる．一方 $\mathbf{E}$ に対する同様な方程式には $\mathbf{J}$ および ρ の両方が入ってくる（勿論 ρ は消去することができるわけではあるが）．そこで出発点として $\mathbf{H}$ に対する（45.1）の方程式を解くことにする．その場合 $\mathbf{J}$ の三つの直交成分は同一の角振動数 ω で時間について調和的に振動しているとする．ただし，各成分の振動の位相は同一である必要はないとしておく：

$$\begin{aligned}J_x(\mathbf{r},t)&=2|J_x(\mathbf{r})|\cos(\omega t-\eta_x)=J_x(\mathbf{r})e^{-i\omega t}+\text{c.c.}\\ J_x(\mathbf{r})&=|J_x(\mathbf{r})|e^{i\eta_x}\end{aligned} \tag{45.2}$$

y および z 成分についても同様な表式をとるものとする．ここで問題にするのは，$\mathbf{E}$ および $\mathbf{H}$ に対する次のような同一の振動数をもつ定常的な状態の解に限っておいてよい．

$$\begin{aligned}\mathsf{E}_x(\mathbf{r},t)&=2|\mathsf{E}_x(\mathbf{r})|\cos(\omega t-\xi_x)=\mathsf{E}_x(\mathbf{r})e^{-i\omega t}+\text{c.c.}\\ \mathsf{H}_x(\mathbf{r},t)&=2|\mathsf{H}_x(\mathbf{r})|\cos(\omega t-\zeta_x)=\mathsf{H}_x(\mathbf{r})e^{-i\omega t}+\text{c.c.}\\ \mathsf{E}_x(\mathbf{r})&=|\mathsf{E}_x(\mathbf{r})|e^{i\xi_x},\quad \mathsf{H}_x(\mathbf{r})=|\mathsf{H}_x(\mathbf{r})|e^{i\zeta_x}\end{aligned} \tag{45.3}$$

ここでもやはり，y および z 成分については同様な表式をとるものとする．（44.2）の第二の方程式から，$\mathbf{E}$ は真空中では $\mathbf{H}$ を使って次式で与えられる．

$$\mathbf{E}(\mathbf{r})=\frac{ic}{\omega}\nabla\times\mathbf{H}(\mathbf{r}) \tag{45.4}$$

（45.2）および（45.3）の表式を代入すれば（45.1）の方程式は次のようになる．

$$(\nabla^2+k^2)\mathbf{H}(\mathbf{r})=-\frac{4\pi}{c}\nabla\times\mathbf{J}(\mathbf{r}),\qquad k=\frac{\omega}{c} \tag{45.5}$$

これは非斉次の方程式になっており，その解は（37.19）のような伝播関数を使って表わすことができ，

$$\mathbf{H}(\mathbf{r})=\frac{1}{c}\int\frac{\nabla\times\mathbf{J}(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)d^3r' \tag{45.6}$$

となる．（45.6）は（45.5）の遅延解になっている；というのは r の大きいところではこの解は r および t に関して $r^{-1}e^{i(kr-\omega t)}+\text{c.c.}$ のように変化する一つの外向きの波に

なっている．つまりある電流要素によってつくり出された場がそれより後の時刻になって現われているわけで，したがって場は電流要素に対して遅延をうけているわけである．

45-2 漸 近 形

輻射場によって運ばれてゆくエネルギーと運動量を考えてみる．以下に示されているように，r の十分大きなところでの場の漸近形中の主要項からエネルギーが求められる．この項は $1/r$ で変化する；角運動量を求めるにはその他に $1/r^2$ で変化するいくつかの項を付け加えておく必要がある．(45.6) の被積分関数の r によって変化する部分は $1/r$ のベキに展開できて

$$\frac{\exp(ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \xrightarrow[r\to\infty]{} \frac{1}{r}\left(1+\frac{r'\cos\theta+\frac{1}{2}ikr'^2\sin^2\theta}{r}\right)e^{ik(r-r'\cos\theta)} \tag{45.7}$$

となる．ただし，θ は $\mathbf{r}'$ と $\mathbf{r}$ との間の角である．(45.7) を (45.6) に代入して (45.4) を同時に使えば漸近的な電磁場は $1/r^2$ のオーダーの項までは完全にきまってくる．

45-3 輻射エネルギー

エネルギー流束のベクトルに他ならないポインティングのベクトルは

$$\frac{c}{4\pi}[\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\times\mathbf{H}(\mathbf{r},t)]$$

に等しい．(45.3) からわかるように，振動の一周期にわたっての Poynting ベルトルの時間平均 $\mathbf{P}(\mathbf{r})$ の一つの典型的な成分として z 成分を取り出せば次のようになる．

$$\begin{aligned}P_z(\mathbf{r})&=\frac{c}{\pi}\{|\mathrm{E}_x(\mathbf{r})||\mathrm{H}_y(\mathbf{r})|[\cos(\omega t-\xi_x)\cos(\omega t-\zeta_y)]_{\text{時間平均}}\\&\quad-|\mathrm{E}_y(\mathbf{r})||\mathrm{H}_x(\mathbf{r})|[\cos(\omega t-\xi_y)\cos(\omega t-\zeta_x)]_{\text{時間平均}}\}\\&=\frac{c}{2\pi}[|\mathrm{E}_x(\mathbf{r})||\mathrm{H}_y(\mathbf{r})|\cos(\xi_x-\zeta_y)-|\mathrm{E}_y(\mathbf{r})||\mathrm{H}_x(\mathbf{r})|\cos(\xi_y-\zeta_x)]\end{aligned}$$

この z 成分と他の二つの成分とはまとめて次のような形に書くことができる．

$$\mathbf{P}(\mathbf{r})=\frac{c}{2\pi}\mathrm{Re}[\mathbf{E}(\mathbf{r})\times\mathbf{H}^*(r)] \tag{45.8}$$

ただし，Re はその次にくる表式の実数部分を示す．ところでここで問題にするのは，エネルギー流束の中の $1/r^2$ で減ってゆく項だけでよい．なぜならばこの種の項だけが輻射エネルギーに対応しているからである；このことから結局，$\mathbf{E}$ および $\mathbf{H}$ について

は $1/r$ のオーダーの項だけをとっておけばよいことになる.

荷電-電流分布の中心から，場が測られている点に向うベクトル $\mathbf{r}$ の方向に z 軸が向くように直交座標軸を選んでおくのが，場の具体的な表式を書きおろすには便利である．このようにとっておくと，$1/r$ のオーダーまでの場は (45.4), (45.6) および (45.7) から次のように与えられる (ただし今の場合 $r=z$ である).

$$\begin{aligned}
H_x &\longrightarrow -\frac{ik}{rc}e^{ikr}\int J_y(\mathbf{r}')e^{-ikz'}d^3r' \\
H_y &\longrightarrow \frac{ik}{rc}e^{ikr}\int J_x(\mathbf{r}')e^{-ikz'}d^3r' \\
H_z &\longrightarrow 0 \\
E_x &\longrightarrow \frac{ik}{rc}e^{ikr}\int J_x(\mathbf{r}')e^{-ikz'}d^3r' \\
E_y &\longrightarrow \frac{ik}{rc}e^{ikr}\int J_y(\mathbf{r}')e^{-ikz'}d^3r' \\
E_z &\longrightarrow 0
\end{aligned} \tag{45.9}$$

これらの表式では $\mathbf{H}$ の被積分関数の中に $\mathbf{J}$ の微係数が現われるのをさけるために部分積分を行なってある．(45.9) からわかるように漸近的な場は伝播方向に対して横に偏っている．さらにこれらの表式により放出される輻射の偏りと電流分布との関係がつく，つまり伝播方向に垂直な電流の成分だけが輻射エネルギーに寄与していることがわかる．これらを (45.8) に代入すれば

$$P_z=\frac{k^2}{2\pi r^2c}\left(\left|\int J_xe^{-ikz'}d^3r'\right|^2+\left|\int J_ye^{-ikz'}d^3r'\right|^2\right) \tag{45.10}$$

(45.10) の表式を一般化して，あるベクトル $\mathbf{k}$ の方向への平均のエネルギー流束を与える次のような形に書き直しておくこともできる.

$$\frac{k^2}{2\pi r^2c}\left|\int J_{\perp\mathbf{k}}(\mathbf{r}')\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')d^3r'\right|^2 \tag{45.11}$$

ただし $J_{\perp\mathbf{k}}$ は $\mathbf{J}$ の $\mathbf{k}$ に垂直な成分である.

45-4 双極子輻射

(45.11) は古典的な電流分布 (45.2) によって輻射されるエネルギーに対する正確な表式である．§44 と同様に，長波長の極限では $kr'\ll 1$ と仮定し被積分関数で exp

$(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}')$ を1で置き換えてやれば電気的双極子近似が得られる．この場合のエネルギー流束は

$$\frac{k^2}{2\pi r^2 c}\left|\int J_{\perp\mathbf{k}}(\mathbf{r}')d^3r'\right|^2 \qquad (45.12)$$

となる．この同じ近似を（45.9）に適用してみれば，輻射の偏り（電場の方向）は全電流ベルトル $\mathbf{J}_0\equiv\int\mathbf{J}(\mathbf{r}')d^3r'$ によって決定されることは明らかである．たとえば $\mathbf{J}_0$ が伝播方向に垂直な平面内に唯一つの成分しかもたぬ場合には輻射は線偏光になっており，$\mathbf{J}_0$ がその同じ平面内で互いに垂直でかつ位相が 90° だけずれている（したがって一方の成分の他の成分の i 倍の）二つの等しい成分をもつ場合には輻射は円偏光になる．

$\mathbf{J}_0$ が一つの成分しかもたぬ場合には（45.12）の $\left|\int J_{\perp\mathbf{k}}(\mathbf{r}')d^3r'\right|^2$ を

$$(\mathbf{J}_0\cdot\mathbf{J}_0^*)\sin^2\theta=|\mathbf{J}_0|^2\sin^2\theta$$

で置き換えて輻射の角分布を求めることができる．ここで，θ は $\mathbf{J}_0$ と $\mathbf{k}$ との間の角度，$|\mathbf{J}_0|^2$ は $\mathbf{J}_0$ とその複素共軛ベクトルとのスカラー積を略記したものである．半径 r の球面上での（45.12）の積分

$$\frac{4k^2}{3c}|\mathbf{J}_0|^2 \qquad (45.13)$$

はこの場合に輻射される全パワーである．（45.13）は $\mathbf{J}_0$ が一つ以上の成分をもちかつこれらが必ずしも同じ位相をもつとは限らぬ場合にもやはり成立する（問題11を見よ）．

45-5 角 運 動 量

単位時間当りに輻射される角運動量は輻射の源になっている荷電-電流分布を中心にした大きな完全吸収球面に働くトルクに等しい．平均のエネルギー流束が $\mathbf{P}$ だから，その（方向への）エネルギー密度は $(1/c)\mathbf{P}$ で運動量密度は $(1/c^2)\mathbf{P}$．輻射は速さ c で外向きに伝播してゆくから $\mathbf{r}$ に垂直な完全吸収面の微小な面積要素 dA に働くトルクは $\mathbf{r}$ と運動量密度とのベクトル積の cdA 倍すなわち $(dA/c)(\mathbf{r}\times\mathbf{P})$ である．半径 r の球面上でこの量を積分すれば単位時間ごとに源から輻射された角運動量が得られる．したがって球面の切線方向の $\mathbf{P}$ の成分だけが問題になる：（45.9）の記法では，z 軸が $\mathbf{r}$ 方向に向っているから，この種の成分とは P_x と P_y に他ならない．

もしも E_z も H_z も零であったとすれば，切線成分 P_x および P_y もまた零であるはずだから角運動量の輻射もないわけである．（45.9）の第三および第六式からは

場の z 方向（つまり半径方向）の成分が $1/r$ より小さなオーダーのものになることしかわからない；実際にはこれらの成分は $1/r^2$ のオーダーなのである．このことは r の大きなところで P_x および P_y が $1/r^3$ のような減り方をすることを意味する．ところで角運動量の表式には $\mathbf{r}\times\mathbf{P}$ が現われかつ吸収球面の面積は r^2 に比例するから，結局今考えている大きな球面で吸収される全角運動量は r によらないことになる．

必要なのは E_z および H_z での $1/r^2$ の項で，他の成分の $1/r^2$ 項はいらない．

$$
\begin{aligned}
\mathsf{H}_z &\longrightarrow \frac{ik}{r^2c}e^{ikr}\int[y'J_x(\mathbf{r}')-x'J_y(\mathbf{r}')]e^{-ikz'}d^3r' \\
\mathsf{E}_z &\longrightarrow \frac{1}{r^2c}e^{ikr}\int[2J_z(\mathbf{r}')+ikx'J_x(\mathbf{r}')+iky'J_y(\mathbf{r}')]e^{-ikz'}d^3r'
\end{aligned}
\tag{45.14}
$$

輻射された角運動量の正確な計算には（45.9）および（45.14）の二つの式で十分である．[1]

45-6　双極子近似の場合

双極子近似の場合（45.9）および（45.14）で kr' についての最低次項だけを残しておけばよいのだから，P_x と P_y に対する表式は簡単化される．たとえば，P_x での主要項は $-(c/2\pi)\,\mathrm{Re}\,(\mathsf{E}_z\mathsf{H}_y{}^*)$ で $(c/2\pi)\,\mathrm{Re}\,(\mathsf{E}_y\mathsf{H}_z{}^*)$ ではないことは容易にわかる．kr' についての最低次までとって次式が得られる．

$$
\begin{aligned}
P_z &= \frac{k}{\pi r^3 c}\,\mathrm{Re}\left(i\int J_z d^3r'\int J_x{}^* d^3r'\right) \\
P_y &= \frac{k}{\pi r^3 c}\,\mathrm{Re}\left(i\int J_z d^3r'\int J_y{}^* d^3r'\right)
\end{aligned}
\tag{45.15}
$$

（45.15）でとられている座標軸は $\mathbf{r}$ にある吸収面の要素 dA に関して固定されたものである．そこで空間中に固定された特定の軸の周りの角運動量の成分を求めることができるようにするには，これらの式を一般の直交座標を使って書き直しておかねばならない．これは（45.10）のエネルギー流束の表式を一般的な形（45.11）に書き直す際の事情と似ているが，ただし今度の場合の方が幾分複雑である．この書き直しを行なう

1）もっと一般的な議論については W. K. H. Panofsky and M. Phillips, "Classical Electricity and Magnetism" (Addison-Wesley, Reading, Mass, 1962)［邦訳：林忠四郎他訳「電磁気学」吉岡書店］の第2版，§14—10; J. D. Jackson, "Classical Electrodynamics", (Wiley, New York, 1962) の §16.3, を見よ．

には，空間に固定された新しい直交座標 $x'y'z'$ を選ぶ．この新しい座標系を基準にすると，古い座標軸の方向は次のような仕方で $\mathbf{r}$ に関係している（第38図を見よ）：z 軸は $\mathbf{r}$ の方向で新しい座標軸に関して極角 θ, ϕ をもつ．y 軸は $\mathbf{r}$ に垂直で $\mathbf{r}$ と z' の平面内にあり，x 軸は $\mathbf{r}$ と z' の平面に垂直になっている．さて次に，$\mathbf{r}$ にある面積要素

$$dA = r^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi$$

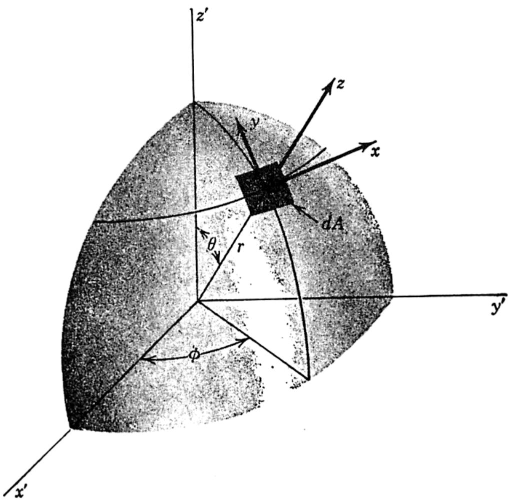
での吸収による角運動量の z' 成分への寄与を計算しようと思えば（45.15）で与えられた P_x だけでよい．この P_x は新しい座標軸の方向にとった全電流ベクトル $\mathbf{J}_0$ の各成分を使って次のように書き直すことができる．

$$P_x = \frac{k}{\pi r^3 c} \mathrm{Re}\,[i(J_{0x'} \sin\theta \cos\phi + J_{0y'} \sin\theta \sin\phi + J_{0z'} \cos\theta) \times (J^*_{0y} \cos\phi - J^*_{0z'} \sin\phi)] \qquad (45.16)$$

P_x に伴う z' 軸の周りのモーメントの腕の長さは $r\sin\theta$，したがって角運動量成分の微分要素は

$$dL_{z'} = \frac{1}{c} r \sin\theta \, P_x r^2 \sin\theta \, d\theta \, d\phi \qquad (45.17)$$

となる．（45.16）を（45.17）に代入して極角について積分すると次式を得る．



第38図 （45.15）の (x, y, z) 座標系と（45.16）の (x', y', z') 座標系との間の関係

$$L_{z'}=\frac{4ik}{3c^2}(J_{0x'}J^*{}_{0y'}-J_{0y'}J^*{}_{0x'}) \tag{45.18}$$

(45.18) から明らかになるように，角運動量のある特定の成分の輻射には $\mathbf{J}_0$ の特定の成分のみが関係している．それだけでなく，お互いの位相がずれている二つの垂直な成分がなければならないのである．なぜならば，もしも $J_{0x'}$ と $J_{0y'}$ がともに実すなわち位相が同一であるならば (45.18) の括弧の内は零になってしまうからである．したがって ($\mathbf{J}_0$ が完全に一つの方向に向っている) 直線双極子の場合には角運動量の輻射はないことになる．$|\mathbf{J}_0|^2$ の値が与えられていて最大の角運動量が輻射されるのは $\mathbf{J}_0$ が互いの位相のずれが 90° でかつ相等しい二つの垂直な成分をもちかつそれらに垂直な第三の成分が零になっている場合である．この場合，零でない成分が x' および y' 軸の方向に向いているとすれば，$J_{0y'}=iJ_{0x'}$ と置くことができる；この場合 (45.18) は

$$L_{z'}=\frac{8k}{3c^2}|J_{0x'}|^2=\frac{4k}{3c^2}|\mathbf{J}_0|^2 \tag{45.19}$$

となり，L の他の二つの成分は零である．

(45.13) と (45.19) とを比較してわかるように，一つの振動電気双極子によって単位時間ごとに輻射される最大の角運動量は，単位時間当りに輻射されるエネルギーの $1/kc=1/\omega$ 倍になっている．もしもこの関係が量子論にもそのまま引き移されるものとすれば一つの電気的双極子によって輻射されるエネルギー量子 $\hbar\omega$ は，それと一緒に $\hbar$ をこえない量の角運動量を運び去っていることを示している．

45-7　古典論から量子論への書き直し

ここで一つの電気的双極子によって輻射されるパワーに対する古典論の表式 (45.13) を量子論に書き換えることにする．このためには，全電流ベクトル $\mathbf{J}_0$ に対する何らかの量子論的な対応量を見つけるとともに，輻射されたパワーを輻射を行っている粒子の状態間の遷移確率に結びつけることが必要である．

$\mathbf{J}$ を高い初期状態 u_k と低い終状態 u_n とに関連した電流密度で置き換えることにしたいわけである．というのは，この k から n への遷移に際してエネルギーは放出されるからである．荷電密度と速度との積として電流密度を表わしかつ速度として質量で割った運動量演算子：$-(i\hbar/m)\nabla$ をとることは自然である．定常状態に対する荷電密

度は粒子の荷電に位置の確率密度をかけたもの，すなわち $e|\psi|^2$ になることは予想されるところである．しかしながら，今の場合は状態間の遷移に関係しているわけだから，この代りに荷電密度として $eu_n{}^*u_k$ をとる.[1] 速度にあらわれる ∇ という演算子が荷電密度に出てくる波動関数に作用する仕方をきめるには §7 で示したタイプの議論によればよい［(7.3) 式を見よ］．このようにして古典的な電流密度に置き換えられるべき一つの量が得られる：

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}) \to -\frac{ie\hbar}{m}u_n{}^*\nabla u_k(\mathbf{r}) \tag{45.20}$$

(45.20) をこれまでに得られたすべての古典論の表式に持ち込めば量子論的な結果を得ることができるものと仮定する.[2]

(45.20) を座標について積分して，(44.20) を使えば全電流ベクトルとして次式を得る.

$$\mathbf{J}_0 = -\frac{ie\hbar}{m}\int u_n{}^*\nabla u_k d^3r = ie\omega_{nk}\int u_n{}^*\mathbf{r}u_k d^3r = -ie\omega_{kn}\langle k|\mathbf{r}|n\rangle^* \tag{45.21}$$

(45.21) を (45.13) に代入すれば輻射されたパワーが与えられる．このパワーを k から n への遷移が自発的に起こる率と各遷移において放出される量子的エネルギー $\hbar\omega_{kn}=E_k-E_n$ との積になっているものと解釈する．そうすれば自然放出に対する単位時間当りの遷移確率は次のようになる．

$$\frac{4e^2k^2\omega_{kn}}{3\hbar c}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 = \frac{4e^2\omega_{kn}}{3\hbar c^3}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2 \tag{45.22}$$

ただしここでは $\omega_{kn}=kc$ という関係を使ってある．

45-8 Planck の分布式

(45.13) の古典論の表式から (45.22) の量子論の表式への移行の正当性はいささかもっともらしいとして主張し得る程度のものにすぎない．ただし，(45.22) の結果そのものが正しいということは，空洞内での熱輻射のスペクトル分布に対する Planck の公式が (45.22) と (44.23) から導き出せることを示すことによって検証することができる．

---

1) u_k でなくて ψ を使うやり方は F. E. Low, *Am. J. Phys.* **29**, 298 (1961) によって論じられたことがある．

2) たとえば，(45.11) の指数関数は ∇ 演算子の前または後のどちらにでもおいておくことができる．というのは結果に入ってくるのは $\mathbf{k}$ に垂直な ∇ の成分だけだからである．

これはまた，吸収，誘導放出および自然放出に対する確率の間の関係が最初に求められるときのやり方に他ならない.[1]

空洞の壁には荷電 e，質量 m の粒子が含まれていて，各粒子は (44.1) に表わされているようにポテンシャル V によって束縛されているものと仮定する．これらの粒子が絶対温度 T で熱輻射との平衡状態にあるとすれば，各振動数の量子は単位時間ごとに吸収されるのと同数だけ放出されていなければならない．振動数 ω_{kn} の量子が放出される率は (44.23) と (45.22) の和に上の状態 k にある粒子の数をかけたものになる．これらの量子が吸収される率は (44.23) と下の状態 n にある粒子の数との積である．ところで統計力学によれば[2]，上の状態と下の状態との粒子数の平衡状態での比は κ を Boltzmann 定数として $e^{-(E_k-E_n)/\kappa T}$ で与えられる．したがって ω_{kn} の添字を省略することにすれば平衡の条件は

$$e^{-\hbar\omega/kT}\left[\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2c}I(\omega)|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2+\frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2\right]$$
$$=\frac{4\pi^2e^2}{3\hbar^2c}I(\omega)|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$$

となる．これは $I(\omega)$ について直ぐに解け，それに同等な次の結果が得られる.

$$\text{エネルギー密度}=\frac{I(\omega)\Delta\omega}{c}=\frac{\hbar\omega^3\Delta\omega}{\pi^2c^3(e^{\hbar\omega/\kappa T}-1)} \tag{45.23}$$

この $I(\omega)$ に対する表式には輻射を放出，吸収する粒子のパラメーター e, m，および $\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$ が入ってきていないことは注目すべき興味ある点である. (45.23) 式と Planck の分布式が一致することは (44.23) と (45.22) の比の一つの検証になっており，結局前者が正しければ後者も正しいことを示しているわけである.

45-9 スペクトル線の幅

電磁波を輻射している古典的振動子はエネルギーを失うわけだからその振動の振幅は時間とともに減ってゆく．したがって振動子によってつくり出されてゆく電磁場の時間に

1) A. Einstein, *Phys. Z.* **18**, 121 (1917). Einstein の A 係数は丁度 (45.22) になっており，彼が B 係数とよんだものは (44.23) を輻射のエネルギー密度 $I(\omega_{kn})/c$ で割ったものになっている（これは円振動数 $\omega_{kn}/2\pi$ ではなく角振動数 ω_{kn} を使って表わされている).

2) たとえば K. Huang "Statistical Mechanics" (Wiley, New York, 1963) の §9.3 を見よ.

ついての変化の仕方は減衰振動関数型：$e^{-\frac{1}{2}\gamma t}\cos(\omega_0 t+\alpha)$ になる．この種の場のフーリェ分解を使えば振動子からの輻射の振動スペクトルがわかる．角振動数が ω のところでの単位振動数領域当りの輻射強度は

$$\frac{1}{(\omega-\omega_0)^2+\frac{1}{4}\gamma^4} \tag{45.24}$$

に比例する．(45.24) によれば，放出されるスペクトル線の強度は $\omega=\omega_0\pm\frac{1}{2}\gamma$ のところではその極大値の半分の値をもつ．γ という量は**スペクトル線の自然幅** ***natural line breadth*** とよばれており，実際に問題になる場合には ω_0 に比べて小さいものになる．

線の幅は明らかに古典振動子の振幅が減少してゆく最初の割合の二倍になっており，振動子のエネルギーの減少する最初の割合に等しい．古典振動子のエネルギーの減少する割合を，それに対応する量子系が高い初期状態にある確率の減少率と結びつけるという考え方は十分うなづける．もしもこの結びつけ方をとるならば，古典論的な線の自然幅は (45.22) で与えられた自然放出に対する最初の単位時間当りの遷移確率だということになる．終状態が基底状態である場合にはこの結果は正しいとしても，もしもこの終状態がある有限な幅をもつならば，そのための線の幅がさらに付け加わることになるはづである．[1]

上に述べた遷移確率と線幅の間の関係は (3.3) の不確定性関係を使えば定性的ではあるがはるかに一般的なやり方で導くことができる．単位時間当りの遷移確率の逆数は量子系が上の（エネルギーが高い）状態に止っている時間の長さのオーダーである．したがって，上の方の状態のエネルギー決定にはこの状態の寿命 $1/\gamma$ に比べてずっと大きなオーダーの時間をかけることはできない．このことは (3.3) にしたがえば，上の状態のエネルギーは $\hbar$ を寿命で割ったもの，すなわち $\hbar\gamma$ の程度をはるかに上まわる精度では決定できないことを意味している．もしも上にある状態のエネルギーがこの程度の大きさで不確定であるならば，放出されるスペクトルの振動数もまた γ だけ不確定（すなわち幅をもってくる）はずであろう．一般に，量子論的なエネルギー準位はその寿命を短くするような任意の過程によって幅をもってくるのである：準位が完全にシャープであるのはその状態の寿命が無限大（すなわち真の定常的エネルギー固有関数）の場合に限られている．

---

1) スペクトル線の幅についてのもっと立ち入った議論は，Heitler（前出）の §18 を見よ．

ある量子系によって放出される電気的双極子線の自然幅についての定性的な観念は γ に対する (45.22) の表式を

$$\frac{\gamma}{\omega_{kn}}=\frac{4}{3}\frac{e^2}{\hbar c}k^2|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$$

という形に書き直してみればつかむことができる．$e^2/\hbar c$ という因子はディメンジョンのない常数で，e を電子荷電とすれば殆ど $\frac{1}{137}$ に近い値をもつ.[1] また $k^2|\langle k|\mathbf{r}|n\rangle|^2$ という因子についてはすでに双極子近似に達する道筋で1に比べて小さいことが仮定されていた．したがって線の幅の角振動数に対する比は極めて小さいものであることが予想されるのである（この比は原子の典型的な双極子線では 10^{-6} のオーダーである）.

46□輻射論のいくつかの応用

この節では本章の前半で説明してきた半古典論的な輻射の理論をまず許容転移に対する諸条件の決定に，つぎに光電効果の理論に応用することにする.

46-1　単一粒子に対する選択則

§44 の終りの禁止転移についての議論からわかるように，双極子行列要素 $\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$ が零である場合には吸収および誘導放出の確率は双極子遷移に比べて少なくとも $(ka)^2$ の因子だけ低くなる．一方，自然放出の確率に対しても同じ注意を適用することができる．なぜなら自然放出に対する表式 (45.11) 中の積分で $\mathbf{J}$ に (45.20) を代入してやれば，この積分は (44.19) と同じ型のものになるからである.

双極子行列要素が零にならないための u_k および u_n に対する条件が**選択則** *selection rule* を構成することになる．選択則を定式化することは，(44.13) の無摂動ハミルトニアンに入っている V が球対称である場合には容易である．§14 で示されているように，この場合エネルギー固有関数は動径距離 r の関数と (14.16) で定義された球関数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ の積で書き表わされる．行列要素 $\langle k|\mathbf{r}|n\rangle$ はその直交成分が x, y, z のそれぞれに対応する行列要素になっているベクトルであった．z の行列要素は

1)　これは原子のエネルギー準位の微細構造の理論に出てくる**微細構造定数** *fine structure constant* である（第XIII章をみよ）.

$\int u_k{}^* r \cos\theta u_n d^3 r$ でこれは r についての積分と角積分

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} Y_{lm}{}^*(\theta,\phi)\cos\theta Y_{l'm'}(\theta,\phi)\sin\theta\, d\theta\, d\phi \tag{46.1}$$

との積として書き表わすことができる．ただしダッシュのついた添字とつかない添字とはそれぞれ低い状態 u_n および高い状態 u_k の角運動量の量子数である．

(46.1) の ϕ についての積分は $\int_0^{2\pi} e^{i(m'-m)\phi} d\phi$ となり，これは $m'=m$ でない限り零になる．したがってこの積分は数係数を別にすれば次の形にかける．

$$\int_{-1}^{1} wP_l{}^m(w)P_{l'}{}^m(w)dw, \qquad w=\cos\theta \tag{46.2}$$

ところで，Legendre の陪関数の母関数 (14.13) を利用して次の関係を証明することができる．

$$wP_l{}^m(w)=\frac{l+|m|}{2l+1}P_{l-1}^m(w)+\frac{l-|m|+1}{2l+1}P_{l+1}^m(w)$$

この関係を (46.2) に代入し，(14.15) の直交性の公式を使えば，z の行列要素が $m'=m$，$l'=l\pm1$ でなければ零になることがわかる．同様な取扱いによって，$m'=m-1$，かつ $l'=l\pm1$ でなければ $x+iy$ の行列要素は零，$m'=m+1$ かつ $l'=l\pm1$ でなければ $x-iy$ の行列要素は零ということがわかる．これらの選択則はまた §28 の末尾の議論からも導くことができる．これらの選択則は中心力場中を運動する一個の荷電粒子の可能な許容（電気的双極子）遷移を決定することになる．

46-2 放出された輻射の偏り

(45.12) 式にひきつづいて行なった議論によって，放出された輻射の偏りは全電流ベクトル $\mathbf{J}_0$ により，したがって [(45.21) によれば] 双極子行列要素によって決定されることがわかっている．始めと終りの状態が l の値が 1 だけ異なっており，z 軸に関して磁気量子数 m は同一であったとすると，零にならないのは z の行列要素だけになる．したがって xy 平面でみれば輻射は z 軸の方向に線偏光になっており，z 軸の方向には輻射は行なわれない．始めと終りの状態の磁気量子数が 1 だけ異なっている場合には，双極子行列要素の x および y 成分には 90° の位相のずれがあり，z 成分は零になる；この場合には輻射は軸の方向からみれば円偏光になっているが，xy 平面でみれば z 軸に垂直の方向の線偏光になっている．これらの結果は磁場内におかれた原子からの輻射に

関連して興味がある（§48 の Zeeman 効果についての議論を見よ）．

46-3 角運動量の保存

（45.18）および（45.19）の議論から，放出された1個の量子によって運び去られる角運動量は $J_{0y}=iJ_{0x}$ のときに最大値 $\hbar$ をもち，かつその方向は z 軸の方向に向いていることがわかっている．（45.21）からわかるように，これは $\langle k|y|n\rangle^*=i\langle k|x|n\rangle^*$，あるいは $\langle k|y|n\rangle=-i\langle k|x|n\rangle$ の場合である．ところで，$x=r\sin\theta\cos\phi=\frac{1}{2}r\sin\theta(e^{i\phi}-e^{-i\phi})$ かつ，$y=r\sin\theta\sin\phi=-\frac{1}{2}ir\sin\theta(e^{i\phi}-e^{-i\phi})$ である．したがって（46.1）での ϕ 積分から明らかなように，y の行列要素が x の行列要素の $-i$ 倍になるためには始状態 u_k の磁気量子数は終状態 u_k の磁気量子数より1だけ大きくなっていなければならない．（14.23）を適用してみればわかるように，このような遷移の際には粒子の角運動量の z 成分が $\hbar$ だけ減少してしまっている．このように角運動量は輻射を行なっている粒子と放出された量子との間で保存されるのである．

これまでの結果は（45.20）で仮定された古典的な電流密度と量子論的な電流密度との間の結びつきを基礎にしている．§45 で Planck の分布法則を導き出してくるのに成功したことは（45.20）の対応関係がその大きさに関する限りでは正しいものであることを示している．上に述べた角運動量の保存を明らかにした議論はそれに付け加えて，（45.20）の関係には始めと終りの状態の位相も適切に含まれていることを示している；たとえばもしも $\mathbf{J}$ が $u_k^*\nabla u_n$ に比例するとでも仮定していたとすれば，すぐ上のパラグラフで矛盾した結果が得られていたはずである．

遷移の際に磁気量子数が変化しない場合には，z の行列要素だけが零にならないことになり，（45.18）式についての議論からこの量子は角運動量を運ばないことがわかる．一寸考えるとこの結果は軌道角運動量の量子数 l が一単位だけ変化していることと矛盾しているように思われるかもしれない．粒子の角運動量の x および y 成分はその z 成分（この場合には $m\hbar$ であることがわかっておりかつこの値は変化しない）とは可換でない．したがってこれらの成分は正確には指定することができない．角運動量の x および y 成分に対する行列の対角要素はすべて零であるから（（27.26）を見よ），量子数 l および m で記述される状態に対するこれらの成分の期待値または平均値は零になる．したがって粒子の角運動量のどの成分についてみても，観測されるような変化は存在し

ない．したがって放出された量子によって持ち去られた角運動量の期待値は零であるべきなのである．定常状態にある一個の粒子の角運動量の x および y 成分は零の周りでゆらぎ運動をしており，そのゆらぎ方は自乗平均値では零でないとしても，平均値は零になっているものと考えておくことができる．l についての変化はこれらの自乗平均値の変化に対応している．

46-4 多粒子系に対する選択則

互いに相互作用していないいくつかの粒子から構成されている量子力学的な系では，全ハミルトニアンは（44.13）に現われている H_0+H' のような項の単なる和になっている．無摂動系のエネルギー固有関数は §40 で論じられたような単一粒子の固有関数の積になる（これらは粒子が同一でなければ非対称なものにしておくことができる）．§44 の一次の摂動理論（吸収および誘導放出）に現われる行列要素には次のような形の多重積分が含まれることは明らかである．

$$\int\cdots\int u_{a'}{}^*(1)u_{b'}{}^*(2)\cdots[H'(1)+H'(2)+\cdots]u_a(1)u_b(2)\cdots d^3r_1d^3r_2\cdots$$

同じ一つの粒子の異なった u の間には直交関係があるため，一つを除いてすべての単一粒子の波動関数 $u_{a'},\cdots$ が対応する波動関数 $u_a,\cdots$ と同じでない限り，この積分は零になる．したがっていくつかの粒子の中で唯一つだけが遷移に際してその状態を変化することができ，中心力場に対する選択則は上に与えられたものと正確に一致する．自然放出の確率は Planck の分布公式によって同一の積分に関係づけうることが保証されている以上，これらの選択則は吸収および誘導放出についてと同様に自然放出についても成立する．

もしも系がそれぞれの間の相互作用を無視することができないいくつかの粒子で構成されている場合には，選択則の基礎として全角運動量およびパリティに対する一般的な保存則をとらねばならない．§44 および §45 の議論を一般化して，輻射の波長が系の拡りに比べて大きいときには考慮すべき主な項は全電気的双極子能率 $e_1\mathbf{r}_1+e_2\mathbf{r}_2+\cdots$ の行列要素であることを示すことは困難ではない．（45.19）についての議論によれば振動している双極子から輻射される角運動量は一量子当り $\hbar$ を超えることはできない；この際の古典論的な議論は任意の電流分布に基づいているものであるから，いくつかの粒子が双極子をつくっている場合にもこの議論は駄目になることはない．放出された量子

と輻射している系との間での角運動量保存の解釈については，取扱い全体が半古典論的な性格のものであるだけ事情は面倒になる．量子電磁力学に基づく首尾一貫した取扱いによれば，この種の保存則に基づく正しい選択則は，系の全角運動量量子数は変化しないか，または単位だけ増減しうるということになる．始めと終りの状態のいずれに対してもこの量子数が零である場合は一つの例外的な場合になっている．この場合には始状態および終状態の波動関数が球対称になっており，§44 の終りで行なった議論を拡張すれば，この種の状態間の輻射による遷移は（双極子的な許容遷移がないという意味で）禁止されているばかりでなく，（一次の遷移は何らかの形でも存在しないという意味で）強く禁止されていることが示される．

§29 におけるパリティの議論を拡張して，全ハミルトニアンが原点に関してすべての粒子の座標を反転しても変化しないならば，各エネルギー固有関数のパリティは（偶か奇かに）はっきりとわけて規定することができることを示すのは容易である．ところで，すぐ前に与えておいた電気双極子能率の演算子は明らかにすべての粒子の反転に関して奇になっている；したがって始めと終りの状態が反対のパリティをもっていない限りその行列要素は零になる．この選択則は **Laporte の規則** *Laporte rule* とよばれている．

46-5　光 電 効 果

荷電粒子を含んでいるある束縛系が十分に高エネルギーの量子で照射されると，ある有限な確率でその系が破壊されるということがある．この種の過程は原子の場合には**光電効果** *photoelectric effect* とよばれ，核の場合には**光分解** *photodisintegration* とよばれている．一例として，$-\epsilon$ を電子の基底状態のエネルギーとして，$\hbar\omega>\epsilon$ のエネルギーの一個の光子によって原子から一個の電子が叩き出される場合を考えよう．電子の始状態の波動関数は $u_0(\mathbf{r})$ とする．終状態では電子は

$$\frac{\hbar^2k^2}{2m}=\hbar\omega-\epsilon \tag{46.3}$$

の運動エネルギーをもつ．輻射は z 軸の正の方向に向って入射しかつその偏りは電場ベクトルが x 軸の方向を向いているものと考えておく．この場合，遷移の行列要素は (44.14) の第二式によって与えられる．

$$\langle k|H'^0|0\rangle=\frac{ie\hbar}{mc}\int u_k{}^*e^{i\omega z/c}A_0\left(\frac{\partial u_0}{\partial x}\right)d^3r \tag{46.4}$$

終状態は十分な精度で平面波 $u_k(\mathbf{r})=L^{-\frac{3}{2}}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ によって表わされるものと仮定する．このことは電子が残りのイオンによって散乱される過程に対して Born 近似が成立するという仮定と同等である．

部分積分を使って（46.4）式は次のようになる．

$$\langle k|H'^0|0\rangle=-\frac{e\hbar A_0k_x}{mcL^{\frac{3}{2}}}\int u_0\exp\left[i\left(\frac{\omega z}{c}-\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}\right)\right]d^3r$$

（35.14）および（35.18）を使えば，束縛状態からイオン化された状態への単位時間当りの遷移確率は

$$w=\frac{mkL^3}{4\pi^2\hbar^3}|\langle k|H^{0\prime}|0\rangle|^2\sin\theta\,d\theta\,d\phi$$

となる．原子に移される運動量 $\hbar\mathbf{K}$ を導入しておくのがこれからの議論には都合がよい：

$$\mathbf{K}=\frac{\omega}{c}\mathbf{1}_z-\mathbf{k} \tag{46.5}$$

ただし $\mathbf{1}_z$ は z 方向の単位ベクトルである．光電効果に対する微分断面積は w を光子の入射束で割ったものに等しい．この入射束は入射強度（44.12）を $\hbar\omega$ で割れば求められ，結局，微分断面積としては次式を得る．

$$\sigma(\theta,\phi)\sin\theta\,d\theta\,d\phi=\frac{e^2kk_x{}^2}{2\pi mc\omega}\left|\int u_0\exp(i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r})d^3r\right|^2\sin\theta\,d\theta\,d\phi \tag{46.6}$$

46-6 光電子の角分布

叩き出された光電子の角分布を決定する項としては（46.6）には二つの項がある．これらの中の一つは $k_x{}^2$ の因子で，これは電子が入射輻射波の偏りのベクトルに関して $\cos^2$ 分布をとる傾向を示している．もしも輻射に偏りがないならば $k_x{}^2$ は $\frac{1}{2}(k_x{}^2+k_y{}^2)$ で置き換えられねばならないが，その結果は入射方向に関して $\sin^2$ 分布になる．いずれの場合にもせよ，電子には入射光子ビームに直角の方向に叩き出されてくるのが圧倒的に多くなる．

（46.6）の被積分関数中にやりとりされる運動量のベクトル $\mathbf{K}$ が現われていることも角分布に影響を与える．（38.29）式の議論が示しているように（46.6）式に現われているような種類の積分は一般的に K が増すにつれて減少する．ところで今の場合，K は $\mathbf{k}$ が z 方向にむいているときに最小になる．したがって（46.6）の K による変化の仕

方は微分断面積の極大を前方方向にずらす傾向をもっている．しかしこの効果が認められる程度になるのは k および ω/c が大きさについて同程度になる場合だけである．一応，(46.3) で ϵ は無視できるものと仮定すればこの ω/ck という量は $\omega/ck \approx \hbar k/2mc = v/2c$ 程度になる．ただし v はとび出した電子の速さ，したがって断面積の極大が前方へずれるという効果は高エネルギーの光子および光電子に対して現われてくる．この種の場合には実際上，上で仮定したように ϵ を無視することができる．[1)]

46-7 原子の光電効果の断面積

次に状況を限定して光電子は原子の最低状態（K すなわち 1s 殻）から叩き出されるものとする．そうすれば始めの波動関数は (16.24) 式の波動関数 $u_{100}(r,\theta,\phi)$ になるわけで，具体的には次式で与えられる．

$$u_0(r) = (\pi a^3)^{-\frac{1}{2}} e^{-r/a}, \qquad a = \frac{a_0}{Z}, \qquad a_0 = \frac{\hbar^2}{me^2} \tag{46.7}$$

u_0 が球対称である限りでは (46.6) の角積分は容易に行なわれて

$$\sigma(\theta,\phi) = \frac{8\pi e^2 k k_x^2}{mc\omega K^2}\left|\int_0^\infty u_0(r)\sin Krr dr\right|^2 \tag{46.8}$$

となる．(46.7) を (46.8) に代入すれば次の結果が得られる．

$$\sigma(\theta,\phi) = \frac{32 e^2 a^3 k k_x^2}{mc\omega(1+K^2a^2)^4} \tag{46.9}$$

(38.4) の議論からわかるように，Born 近似は高い入射エネルギーでかつ $Ze^2/\hbar v \ll 1$ の場合に最も正しいものに近い記述になっている．ところで $\epsilon = Z^2e^2/2a_0$，したがって $\hbar^2k^2/2m\epsilon = (\hbar v/Ze^2)^2$．結局 (46.3) 式で ϵ を無視することができる．前に示したように，この場合 $\omega/ck \approx v/2c$ であるから (46.5) で与えられている K の大きさは近似的に $k(1 - v\cos\theta/2c)$ となる．さらに，$ka = \hbar v/Ze^2 \gg 1$．したがって (46.9) 式の分母で $1+K^2a^2$ という因子は近似的に $k^2a^2(1 - v\cos\theta/c)$ で置き換えることができる．結局，高エネルギー光電効果の微分断面積として次式を得る．

$$\sigma(\theta,\phi) \approx \frac{32e^2}{mc\omega(ka)^5}\sin^2\theta\cos^2\phi\left(1 + \frac{4v}{c}\cos\theta\right) \tag{46.10}$$

---

1) k と ω/c の二つの量はまた，$\hbar\omega$ が ϵ に比べて僅かに大きくなっている光電効果の閾値(しきい) (threshold) 近傍でかなり接近した値をとりうる．しかし，この場合には Born 近似は正しくない．

電子は非相対論的に取り扱われてきたのだから v/c は1に比べて十分小さなものでなければならない．その意味で v^2/c^2 のオーダーの項は（46.10）式では無視しておいた．角についての積分から全断面積が得られて

$$\sigma \approx \frac{128\pi}{3} \frac{e^2}{mc\omega(ka)^5} \tag{46.11}$$

となる．σ が $Z^6/(\hbar\omega)^{\frac{7}{2}}$ に比例することが（46.3）と（46.7）から導かれる．（46.11）を使うにあたっては σ が K 電子のそれぞれについての全断面積であることを考えておかねばならない．つまりその結果 K 殻の光電効果に対する全断面積を求めるには2倍にしておかねばならない．

（46.10）式で v/c を1に比べて無視したときの支配的な項および（46.11）のすべての項が §44 で論じた電気的双極子近似から導かれるということは注目すべき興味あることである．この近似では $e^{i\omega z/c}$ は（46.4）中では1で置き換えられている．

46-8 Born 近似の改良

これまでの計算が一次の摂動論を基礎にしてきたことについては二つの論点がある．第一に（46.4）の行列要素は十分小さいと見なすことができ，したがって電子と電磁場との間の相互作用の取扱は一次まででとめられている．第二には，電子波動関数は終状態では平面波であると見なされている．したがってこの状態に対するイオンによるポテンシャルの効果が無視されている．第一の観点から計算を改良することは極めて難しいし，また電子-電磁場間の相互作用が小さいことを考えれば殆どその労力に値しないと考えられる．一方，第二の観点からの改良は実行可能でもあり，かつもし結果が得られればそのときには $Ze^2/\hbar v$ が1に比べて小さくなければならないということはないはずだから，その結果を低エネルギーに対して，または Z の大きな値に対して適用できるはずである．このことを考えればこの改良の実行に当って生じる若干の面倒さも正当化される．この種の計算は §38 で論じられた歪曲波 Born 近似を利用すれば実行することができる．

問　題

1. $\nabla\cdot\mathbf{J}=\rho=0$ の場合，Maxwell の方程式の最も一般的な解を $\nabla\cdot\mathbf{A}=\phi=0$ を満たすポテンシャルを使って表わしうることを示せ．

2. (44.1) 式に付随した確率密度は (7.1) で与えられること，かつこの確率の流れの密度は (7.3) とは異なったものにならなければならないことを示せ.

3. ゲージ変換 (44.5) に伴って変換 $\psi'=\psi e^{ie\chi/\hbar c}$ を行なった場合には波動方程式 (44.1) の形は変わらないことを示せ.

4. e は電子の荷電，A は摂氏数千度の空洞内の輻射に相当するスペクトルの可視部に対するベクトルポテンシャルの大きさ，p は水素の最初の励起状態にある電子の運動量としたときの eA/cp のオーダーを算定せよ.

5. (44.20) 式を行列の方法を用いずに，波動方程式を使って証明せよ.

6. 遷移振動数の近傍での場の一つの状態当りに1個の量子が存在するような強度の等方的な場によって生じる誘導放出を考えれば，この誘導放出の遷移確率は自然放出の遷移確率に等しくなっていることを示せ.

7. 最初の励起状態 ($2P$) にある一個の水素原子が空洞内におかれている．自然放出および誘導放出に対する遷移確率が等しくなる空洞の温度はいくらぐらいか？

8. 最初の励起状態にある水素原子の自然放出による単位時間当りの遷移確率は sec^{-1} で表わしてどの程度か？

9. 一次元調和振動子の許容遷移に対する選択則はどうなるか？ また，最初の励起状態にある振動子の自然放出による単位時間当りの遷移確率は sec^{-1} で表わしてどの程度か？ ただし，e, m, ω は問題8と同じとする.

10. 電子衝撃による一電子原子の励起で，それに対応する輻射遷移が許容遷移である場合には，この励起の断面積には第9章問題9にあるような対数因子が常に表われることを示せ．かつ，電子衝撃による励起に対する断面積とそれに対応した自然放出に対する遷移確率との間に成り立ちうる最も簡単な関係を導け．ただし，その輻射遷移は許容遷移であるものと仮定せよ.

11. 輻射強度に対する (45.12) の表式を使って $J_{0y}=iJ_{0x}$, $J_{0z}=0$ の場合の輻射の角分布を求めよ．また輻射された全パワーはこの場合もやはり (45.13) 式で与えられることを示せ.

12. 水素原子の遷移に対しては，(44.19) の $\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}$ は $e^2/\hbar c\approx\frac{1}{137}$ のオーダーになることを示せ.

13. 重陽子を構成している陽子と中性子との間の相互作用が $a=0$ (すなわち作用距離が0，いいかえれば δ-関数型の相互作用) の四角な井戸型ポテンシャルで表わすことができかつこの系の唯一の束縛されたエネルギー準位は $l=0$, $\epsilon=2.23\,\mathrm{Mev}$. (million electron volts) のものであると仮定せよ．光分解の断面積の計算において終状態の波動関数を平面波とみなしても誤りがないことを示せ．また，偏りのない光子による光分解の微分断面積と全断面積を求めよ.

第XII章　原子・分子・原子核

この章の目的は原子系の諸性質の完全な展望をあたえることにあるわけではない．むしろ量子力学の興味深くかつ有益な応用例となるという理由から，物質の構造に関係して生ずる問題の中から比較的少数の問題を選び出して説明するのが本来の目的なのである．これらの問題はその主題に応じて原子，分子，原子核と分類されている；それぞれの主題についてその範囲こそ極めて限定されているが，一貫した取扱いに十分なだけの説明的な材料は含ませてある．

47□原子構造におけるいろいろな近似[1)]

最も軽い2つの原子，すなわち水素，ヘリウムの基底状態についてはそれぞれ §16 と §32 とで調べておいた．ヘリウムについて説明したのと同じような変分計算は，他の多くの軽い原子について行なわれてきている．この節では比較的重い原子に対して用いられる近似法のいくつかを説明する．アルカリ原子は別に §48 で扱うことにする．

47-1　中心力場の近似

非常に軽い原子は別として，すべての原子に対する計算の出発点は**中心力場の近似** *central-field approximation* である．これは原子内電子の各々が核と自分以外の電子によって作られる球対称のポテンシャル・エネルギー $V(r)$ の中で運動すると仮定するものである．この近似は他の電子が接近して通過することによって起きる一電子に対する $V(r)$ からのずれが小さいときによい近似になる．核によるポテンシャルは一定で，その大きさは近傍の電子の各々によるポテンシャルのゆらぎに対してその Z 倍のオーダー

1)　この節および次の節の素材のもっと詳しい議論は，E. U. Condon and G. H. Shortley, "The Theory of Atomic Spectra" (Cambridge, London, and Macmillan, New York, 1935)；J. C. Slater, "Quantum Theory of Atomic Structure," vol. II (McGraw-Hill, New York, 1960). を見よ．

であり，しかも後者は電子間の距離もともに(逆比例して)非常にゆっくりと変化するのであるから，実際上にのべた事情はこの場合にあてはまるわけである．そこでこの近似では中心力場の計算と，それから得られた近似的結果の補正が二つの基本的な問題になる．これらの問題を考えるまえに，まず中心力場の二，三の一般的な性質を論じよう．

中性の原子ではポテンシャルの測られている電子をとりのぞいたあとには，一価の正の荷電のイオンがのこることになるから，ポテンシャル・エネルギー $V(r)$ は核からの距離 r の大きいところでは，$-e^2/r$ というクーロン型になっている．水素原子内の電子についてはすべての r に対してポテンシャル・エネルギーは $-e^2/r$ の形になっていて，このポテンシャルに対しては，§16 で示したように量子数 n, l, m で標示される無限に多くの束縛されたエネルギー準位が存在する．上に考えた $V(r)$ に対しても，やはり無限に多くのエネルギー準位があるものと予想される．というのは大きな n に対しては，電子の波動関数は核の近くでは小さく，r の大きいところでの $V(r)$ の形だけが意味をもつと考えられるからである．この二つの場合で事情が違ってくる重要な点は水素原子の場合に起こった n が同じで，l が異なっている状態の間の縮退が非クーロン型の中心力場では除かれるということである．これは小さい角運動量を持つ電子は，核の近くをよぎり，そこでは他の電子による核の遮蔽がより不完全になるため $V(r)$ が $-e^2/r$ に比べてより強く（負の方により深く）なるからである．したがって与えられた n に対しては，l の値がもっとも低い状態が最低のエネルギーをもつことになる．m についての縮退は，ポテンシャルが球対称でありさえすればいつでも起こるものであるから，この場合にも変らない．

スピンを考慮すれば，4つの量子数 n, l, m_l, m_s が中心力場での電子の状態を指定するために必要になる．軌道量子数 l, m_l は水素原子の l, m と同じであり，$m_s=\pm\frac{1}{2}$ はスピンの向きを指定し，n は水素原子のときに現われた全量子数の自然な一般化である．(16.14) で示されているように $n-l-1$ は水素波動関数の半径部分の節点の数になっているが，この n の定義は一般の中心力場にももちこされる．したがって l は $n-1$ をこえることはない．

47-2　元素の周期系列

パウリの排他原理によれば（§40 の反対称波動関数の議論を見よ），一つ以上の原子内

電子が上にのべた4つの量子数の値の特定の組を共有することはできない．Zが増すにしたがって，電子は次ぎ次ぎに最もエネルギーの低い一電子状態を満たして行く；中心力場近似でのある原子の基底状態とは，電子によって占められていない状態の中には，すでに占められている電子状態よりエネルギーの低いものが存在しない状態である．m_l と m_s に対する縮退のため，$2(2l+1)$ だけの電子は同じエネルギーを持つことになる．これらの電子は n と l で指定される一つの**殻** ***shell*** をつくるといわれる．すると基底状態での原子内電子の**配置** ***configuration*** は各々の殻内の電子の個数を指定することによって表わすことができる．そして中心力場近似では，大低の場合最も高いエネルギーをもつ殻を除いて一つでも電子を持っている殻は完全に満たされていることになる．

原子の化学的性質の大部分を決定するのは，最もエネルギーの高い殻に含まれていて束縛され方の最もゆるい電子すなわち**価** ***valence*** 電子である．最も重要な因子は，電子を含んでいて最も高いエネルギーの殻の中でのふさがっている電子状態とふさがっていない状態の数および次に高いエネルギーを持つ（空の）殻との間のエネルギー間隔である．たとえば，ある原子で最も高い殻が完全に満たされており，もう一つ上の殻との間にかなりのエネルギーの差があるときには，電子が他の原子との間で共有されて分子を作るようなことが起こりにくく，そのためその原子は化学的に不活性になる傾向がある．Zが増すにつれて最高エネルギー殻の類似の構造がほぼ周期的に繰返して表われるという事情が化学元素の**周期系列** ***periodic system*** の原因になるのである．

分光学の慣用の記法によれば殻の n の値は数字で，l の値は文字で，また殻の中の電子の数は上につけた数字の添字で表わすことになっている．l に対する文字符号，およびその殻中の電子の最大数 $2(2l+1)$ は次の通りである．

$$l=0,\ 1,\ 2,\ 3,\ 4,\ 5,\cdots$$
$$s,\ p,\ d,\ f,\ g,\ h,\cdots$$
$$2(2l+1)=2,\ 6, 10, 14, 18, 22\ \cdots$$

たとえばナトリウム（$Z=11$）と水銀（$Z=80$）の基底状態の電子配置は次のようになっている．

$$\mathrm{Na}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s$$

$$\mathrm{Hg}: 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 4s^2 3d^{10} 4p^6 5s^2 4d^{10} 5p^6 6s^2 4f^{14} 5d^{10}$$

元素の基底状態の配置は，多くの場合殻のエネルギーの増す順序がわかっており

さえすればかき下すことができる．この順序は分光学的な根拠から推論することができて，次のようになっている：

$$1s, 2s, 2p, 3s, 3p, [4s, 3d], 4p[5s, 4d], 5p, [6s, 4f, 5d], 6p, [7s, 5f, 6d]$$

括弧で囲っておいた殻は殆ど同じエネルギーを持っているので必ずしもこの順に満たされてゆくとは限らない．この種の殻が互いに接近したエネルギーをもつ理由は，n の増大と l の減少との効果がお互いにうちけし合う傾向にあるためである；たとえば $4s$ 状態は水素では $3d$ 状態よりも高いエネルギーを持っているのであるが，角運動量が小さいために核の近くを貫通するので，エネルギーが下げられてくる．各々の括弧の中の s 殻は常にまず第一に満たされるのであるが，括弧の中の他の殻が満たされるにつれてその電子の一方または両方ともをうしなうことがある．括弧を別にすればここに示された殻の満たされる順番からのずれはない．

第2表には各々の元素の，基底状態の電子配置が与えられている．ある原子については表でその位置の上および左にでている殻は満たされている．s 電子の数は各々の d 殻が満たされるにつれて変化するから d 列は s 電子の数を示すために小分けされている．基底状態の配置で部分的に満たされた f 殻を持つものと思われる原子の2つのグループは*（稀土類）および†（最も重い元素群）の位置に入る．第一のグループは満たされた $6s$ 殻を，第二のものは満たされた $7s$ 殻を持っている；各々のグループの d, f 殻の電子分布は主表の下の方に示してある．

周期性の中で特に触れておく価値があると思われるのは次の二，三の点である．$1s$ 以上のそれぞれの s 殻に最初に入る電子がアルカリ元素を与える．そしてこれらの一つの前の（つまり満たされた $1s$ 殻または満たされた p 殻をもっている）元素は稀ガスになる．p 殻に同数の電子をもっている元素は同じような化学的性質をもっている．このことは特にハロゲン（満たされた p 殻に一つだけ電子を欠く）について著しい．$2s$ および $3s$ 殻が満たされている元素（Be および Mg）につづく p 殻が順次に満たされてゆく元素は，やはり s 殻が満たされているが次に d 殻または f 殻が満たされてゆくアルカリ土類とは少し性質がちがっている．$4s$, $3d$ 殻が一杯になると $5s$, $4d$ 殻が一杯になったときと同じような元素が現われる．括弧の中に入れておいた殻が満たされた配置に対応する元素（Zn, Cd および Hg）は，この配置に比べて s 電子が一つだけ足りない貴金属（Cu, Ag および Au）の場合と同様に全くよく似た性質をもっている．

第2表　元素の基底状態の電子配置[1]

		s	s^2	p	p^2	p^3	p^4	p^5	p^6	d	d^2	d^3	d^4	d^5	d^6	d^7	d^8	d^9	d^{10}
$1s$		H 1	He 2																
$2s$		Li 3	Be 4																
$2p$				B 5	C 6	N 7	O 8	F 9	Ne 10										
$3s$		Na 11	Mg 12																
$3p$				Al 13	Si 14	P 15	S 16	Cl 17	A 18										
$4s$, $3d$	$4s^0$																		
	$4s$	K 19	Ca 20											Cr 24					Cu 29
	$4s^2$									Sc 21	Ti 22	V 23		Mn 25	Fe 26	Co 27	Ni 28		Zn 30
$4p$				Ga 31	Ge 32	As 33	Se 34	Br 35	Kr 36										
$5s$, $4d$	$5s^0$																		Pd 46
	$5s$	Rb 37	Sr 38										Nb 41	Mo 42		Ru 44	Rh 45		Ag 47
	$5s^2$									Y 39	Zr 40			Tc 43					Cd 48
$5p$				In 49	Sn 50	Sb 51	Te 52	I 53	Xe 54										
$6s$, $4f$, $5d$	$6s^0$																		
	$6s$	Cs 55	Ba 56															Pt 78	Au 79
	$6s^2$									La* 57	Hf 72	Ta 73	W 74	Re 75	Os 76	Ir 77			Hg 80
$6p$				Tl 81	Pb 82	Bi 83	Po 84	At 85	Rn 86										
$7s$, $5f$, $6d$	$7s^0$																		
	$7s$	Fa 87	Ra 88																
	$7s^2$									Ac 89	Th† 90								

		f	f^2	f^3	f^4	f^5	f^6	f^7	f^8	f^9	f^{10}	f^{11}	f^{12}	f^{13}	f^{14}
* $4f$:	$5d^0$		Ce 58	Pr 59	Nd 60	Pm 61	Sm 62	Eu 63		Tb 65	Dy 66	Ho 67	Er 68	Tm 69	Yb 70
	$5d$							Gd 64							Lu 71
† $5f$:	$6d^0$														
	$6d$		Pa 91	U 92	Np 93	Pu 94									

1) この表は Condon-Shortley（前掲書）の333頁からとったものに，G. W. C. Kaye and T. H. Laby "Tables of Physical and Chemical Constants" (Longmans, London, 1966) の198～199頁による最近の決定を付け加えたものである．最も重い元素で，この表に含まれていないものに次のものがある．アメリシウム (Am, 95)，キューリウム (Cm, 96)，バークリウム (Bk, 97)，カリフォルニウム (Cf, 98)，アインシュタニウム (Es, 99)，フェルミュウム (Fm, 100)，メンデレビィウム (Md, 101)，ノーベリウム (No, 102)，ローレンシウム (Lr, 103)．

47-3 Thomas-Fermi の統計的モデル

ところで先にあげた中心力場近似に関連した問題の第一のものに話をもどそう．ポテンシャル・エネルギー $V(r)$ を定めるためにこれまで用いられてきている方法には次の二つのものがある．その第一は Thomas[1] および Fermi[2] によるものでそれをこの節で論じる．第二は Hartree によるものでこれは後で取り上げる．今ある体積を考えて，この体積内を通じてのポテンシャルの変動のそれ自身に対する割合が極めて小さいものだとすれば，この体積の内部に多数の原子を局在させて考えることができる．**Thomas-Femi の統計的モデル** ***Thomas-Fermi statistical model*** というのは，電子の一波長内での $V(r)$ の変化が今述べた意味で十分ゆるやかなものと仮定するのである．この場合，電子は統計力学的に取扱うことができ，§40 でのべた Fermi-Dirac の統計にしたがう．通常の温度では，熱エネルギー kT は原子の周縁部を除けばいたるところで $V(r)$ に比べて極めて小さい．一方，原子の周辺では電子の存在する確率は極めて小さくなっている．この場合，電子状態は先に仮定したようにエネルギーの増える順番に満たされていることが Fermi-Dirac の統計から要求される．このような取扱い方とこの節の始めの方で述べたもっと一般的な議論とのちがいは，ここでは多数の電子の運動をその内部に限定しうると考えられている領域を通じて $V(r)$ が殆ど一定と考えておいてよいという仮定が付け加っていることである．

一辺の長さが L でその壁では波動関数が周期条件を満たしているような立方体の中の電子状態の数は $(L/2\pi)^3 dk_x dk_y dk_z$ であることはすでに §11 で計算されている．可能な二つのスピン状態を考慮するには，これを二倍しておけばよい．するとその運動量 $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ の大きさが p_0 に等しいかまたは p_0 より小さい状態の数は次のようになる．

$$2\left(\frac{L}{2\pi}\right)^3\int_0^{p_0/\hbar}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}k^2dk\sin\theta\,d\theta\,d\phi=\frac{p_0{}^3L^3}{3\pi^2\hbar^3}$$

もしこれらのすべての状態が満たされているならば，単位体積の中にある運動エネルギーが $p_0{}^2/2m$ をこえない電子の数は $p_0{}^3/3\pi^2\hbar^3$ である．さて核から任意の距離 r だけはなれたところでの最大の運動エネルギーは $-V(r)$ のはずである．さもないと電子が原子をはなれて逃げ出すことになるからである．こうして電子の体積密度 $n(r)$ とポテ

1) L. H. Thomas, ***Proc. Cambridge Phil. Soc.***, **23**, 542 (1927)
2) E. Fermi, ***Z. Physik***, **48**, 73 (1928)

ンシャル・エネルギーとの間に次の一つの関係が得られる．

$$n(r)=\frac{[-2mV(r)]^{\frac{3}{2}}}{3\pi^2\hbar^3} \tag{47.1}$$

静電ポテンシャル $V(r)/e$ はまた Poisson の方程式によって電荷 $en(r)$ を使って次のように定められる．

$$-\frac{1}{e}\nabla^2V=-\frac{1}{er^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dV}{dr}\right)=4\pi en(r) \tag{47.2}$$

(47.1) と (47.2) の方程式は n と V に対する二つの連立方程式である．解に対する境界条件は，原子番号 Z の中性原子に対しては V だけを使って表わすことができる．まず $r\rightarrow 0$ にしたがって，ポテンシャル・エネルギーの主な部分は核だけによるようになるはずである．つまり $V(r)\rightarrow -Ze^2/r$ である．また $r\rightarrow\infty$ にしたがって，半径 r の球の中には差引では電荷がないことになるはずだから，V は $1/r$ よりも速く小さくなり，かつ $rV(r)\rightarrow 0$ となる．この無限遠での境界条件は，この節で前に仮定した V が $-e^2/r$ という漸近形をとるはずだとする条件とは異なっている．前に論じられた V は原子内電子の個々の一つが経験するポテンシャルだったが，一方 Thomas-Fermi のポテンシャルは無限に小さい試験体に作用するポテンシャルである．この二つのポテンシャルの間の相違は Thomas と Fermi によってなされた近似の統計的な性質をはっきりと示している．m^3e^4 が一定であるように m が無限に大きくなり e が無限に小さくなる極限では，この V に対する解は正確なものである；そのときには電子の波長が零となり粒子の密度が無限大になっている．この極限では，ポテンシャルは多数の波長にわたる範囲で一定とみなされ，統計力学を適用するに十分なほど多数の粒子が存在しうることになる．

47-4 ポテンシャルを求めること

(47.1) と (47.2) の方程式から $n(r)$ を消去すると，$-V(r)$ に対する一つの方程式が導かれる．

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left[r^2\frac{d(-V)}{dr}\right]=\frac{4e^2[-2mV(r)]^{\frac{3}{2}}}{3\pi\hbar^3} \tag{47.3}$$

(47.3) と上で与えた境界条件をディメンジョンのない形式に書き表わしておくのが便利である．この形式では Z, E, m および $\hbar$ は尺度をきめる因子として表われるだけになる．つまり次のようにおく

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{r}\chi, \quad r = bx$$
$$b = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\hbar^2}{me^2 Z^{\frac{1}{3}}} = \frac{0.885a_0}{Z^{\frac{1}{3}}} \tag{47.4}$$

ただし，$a_0 = \hbar^2/me^2$．これらの書き換えによって，(47.3) および境界条件は次のようになる．

$$x^{\frac{1}{2}}\frac{d^2\chi}{dx^2} = \chi^{\frac{3}{2}}$$
$$x = 0 \text{ で } \chi = 1 \qquad x = \infty \text{ で } \chi = 0 \tag{47.5}$$

(47.5) の方程式の最も正確な解は最初の微分解析器を利用して Bush と Caldwell[1] によって計算された．この解は数表の形で表わされている．

原子の “半径” を電子全体の内のある一定の割合の部分を内に含んでいる球の半径と解釈するものとすれば，この原子 “半径” は原子番号の立方根に逆比例することが (47.4) からわかる（問題1を見よ）．またこれらの方程式を使って，Thomas-Fermi の近似は Z が増すにつれて近似としてよくなることを示すことができる．まず原子半径のところでのポテンシャルは $Z^{\frac{4}{3}}$ に比例している．したがって，代表的な電子の波長は $Z^{-\frac{2}{3}}$ に比例する．一方，ポテンシャルの空間的な変化分が元の値に対して一定の割合に達する距離は原子半径すなわち $Z^{-\frac{1}{3}}$ に比例する．結局，一電子波長当りのポテンシャルの変動の割合は $Z^{-\frac{1}{3}}$ に比例することになり，Z がふえるとともにこの変動が減ることがわかる．さらに，電子の数は Z に等しいから，Z が増すとともに統計的な方法を用いることがより妥当なものになるのである．

47-5 Hartree の自己無撞着場*) の方法

中心力場を求めるための第二の方法は Hartree よるものである．[2] この模型では一つの電子に伴う荷電はその位置の確率密度の e 倍であるという仮定の下で，各電子は原子核のポテンシャルと他のすべての電子の波動関数を使った荷電から計算することができる一つの中心力場の中を運動しているものと考えるのである．それぞれの電子に対する中心力場を入れた Schrödinger 方程式を各電子について解き，その結果として得られた

1) V. Bush-S. H. Caldwell, *Phys. Rev.*, **38**, 1898 (1931)
2) D. R. Hartree, *Proc. Cambridge Phil. Soc.*, **24**, 111 (1928)
*) self-consistent field の訳．

波動関数を，それらを計算するのに用いた場と矛盾しないようにとるわけである．要するに k 番目の電子は一つの規格化された波動関数 $u_k(\mathbf{r}_k)$ によって記述されることになるが，この波動関数は次の Schrödinger 方程式の解である．

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k{}^2-\frac{Ze^2}{r_k}+\sum_{j\neq k}\int|u_j(\mathbf{r}_j)|^2\frac{e^2}{r_{jk}}d^3r_j\right]u_k(\mathbf{r}_k)=\epsilon_k u_k(\mathbf{r}_k) \quad (47.6)$$

ただし $r_{jk}=|\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_k|$ である．原子の中に Z 個の電子があるとすると，(47.6) は Z 個の関数 $u_k(r_k)$ に対する Z 個の連立，非線型，微分積分方程式の一組を構成していることになる．したがって，これらの方程式を直接に解くことは実際にはとてもできない．そこで Hartree は逐次近似の方法を利用した．

(47.6) の第二項および第三項を近似的に表わしている一つのポテンシャル・エネルギーを仮定し，それを使って各電子の波動関数を計算する．これらの波動関数から各電子に対する新しいポテンシャルが求められる．この手続きはポテンシャルが高いオーダーの正確さで自己無撞着 self-consistent になるまでつづけられる．その際用いられる近似の主な点は，(47.6) の第三項として与えられているポテンシャル・エネルギーについて，これを球対称にするために $\mathbf{r}_k$ の角度方向にわたって平均をとってしまうことである．そうすれば，(47.6) の解は動径関数と球面関数との積として表わすことができる．また一つの殻の中の $2(2l+1)$ 個またはそれ以下の電子はすべて同一のポテンシャルの中を運動しているとする．そうすればこれらは同一の動径関数をもつことになって問題は一層簡単化されることになる．

Hartree 近似ではすべての電子に対する全系波動関数は一電子関数の単なる積

$$\psi(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2,\cdots,\mathbf{r}_Z)=u_1(\mathbf{r}_1)u_2(\mathbf{r}_2)\cdots u_Z(\mathbf{r}_Z) \quad (47.7)$$

であると仮定している以上，電子間の相関が無視されていることは明らかである．反対称化された波動関数を用いていないこともまた (47.7) から明らかである．反対称性は一電子状態 u_k の量子数が排他原理を満たすようにえらばれているという限りでしか考慮されていない．[1]

47-6 変分法との関係

Hartree 近似は試験関数 (47.7) を使った変分計算の最適条件から導かれることを次に

1) Hartree-Fock の方法では反対称化が考慮されている，Slater (前掲書) の第17章を見よ．

示そう.[1] スピン—軌道相互作用の項（§47-7 を見よ）は無視するとして，電子間の相互作用を入れた波動方程式は

$$H\psi=E\psi$$

$$H=\sum_k\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k{}^2-\frac{Ze^2}{r_k}\right)+\sum_{j>k}\sum\frac{e^2}{r_{jk}} \tag{47.8}$$

となる．ここで $j>k$ は添字 j および k の相異なるすべての組についての二重和を意味している．ここでHの期待値を最小にしたいわけである．

u_k は規格化されているから，(47.7) と (47.8) とから次式が得られる．

$$\begin{aligned}\int\cdots\int\psi^*H\psi d^3r_1\cdots d^3r_Z\\ =\sum_k\int u_k{}^*(\mathbf{r}_k)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k{}^2-\frac{Ze^2}{r_k}\right)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_k\\ +\sum_{j>k}\sum\iint u_j{}^*(\mathbf{r}_j)u_k{}^*(\mathbf{r}_k)\frac{e^2}{r_{jk}}u_j(\mathbf{r}_j)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_jd^3r_k\end{aligned} \tag{47.9}$$

最適条件を満たす ψ は (47.9) を極小にするように各 u_k を独立に変分することによって求められる．(47.9) がある特定の一電子関数 u_k に関係しているのは次のような項を通してだけである．

$$\begin{aligned}\int u_k{}^*(\mathbf{r}_k)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k{}^2-\frac{Ze^2}{r_k}\right)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_k\\ +\sum_{j\neq k}\iint u_j{}^*(\mathbf{r}_j)u_k{}^*(\mathbf{r}_k)\frac{e^2}{r_{jk}}u_j(\mathbf{r}_j)u_k(\mathbf{r}_k)d^3r_jd^3r_k\\ =\int u_k{}^*(\mathbf{r}_k)H_ku_k(\mathbf{r}_k)d^3r_k\end{aligned} \tag{47.10}$$

$$H_k\equiv-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_k{}^2-\frac{Ze^2}{r_k}+\sum_{j\neq k}\int|u_j(\mathbf{r}_j)^2|\frac{e^2}{r_{jk}}d^3r_j$$

(47.10) の積分は演算子 H_k の関数 u_k に対する期待値に他ならない．§32 の議論によれば，u_k が H_k の 最低の固有値 ϵ_k に対応する固有関数であるとき，すなわち

$$H_ku_k=\epsilon_ku_k \tag{47.11}$$

のとき，この積分は極小になる．(47.11) と (47.6) の二つの方程式は同等であることから，Hartree の波動関数は変分法の見地からすれば (47.7) の形に書きうる関数の中では最適の関数になっていることがわかる．

この波動関数に属するエネルギーは (47.9) の積分に他ならない．これはまた

1) J. C. Slater, *Phys. Rev.* **35**, 210 (1930); V. Fock, *Z. Physik*, **61** 126 (1930)

(47.6) を使って次のように書くことができる.

$$\int\cdots\int\psi^* H\psi d^3r_1\cdots d^3r_Z=\sum_k \epsilon_k$$

$$-\sum_{j>k}\sum\iint|u_j(\mathbf{r}_j)|^2|u_k(\mathbf{r}_k)|^2\frac{e^2}{r_{jk}}d^3r_jd^3r_k \qquad (47.12)$$

ϵ_k の和をとってしまうと，その際に電子間の静電的相互作用の項が二重に勘定されることになるので，それを差し引いておかねばならない．その結果 (47.12) が与えられる．このように，原子のエネルギーは丁度 ϵ_k の和にはなってはいない．ただし各 ϵ_k は大体のところでは k 番目の電子を取り除くためのエネルギーになっているのではあるが，この最後に述べたことは勿論厳密には正しくない．というのは，一つの電子を取り除くということは自己無撞着場を変化させることになり，したがって残りの電子に対する波動関数および ϵ を変化させることになるからである．ただし，ϵ_k は内の方にある電子 (X-線準位) の場合には，それを取除くためのエネルギーに対する極めてよい近似になっていることが知られている．

47-7 中心力場近似に対する補正

ここで本節の始めに触れた第二の問題，すなわち中心力場から得られた近似的な結果に対する補正の問題にかえることにする．中心力場近似では次の二つの項が無視されている：一つは電子間の実際の静電的な相互作用と中心力場に含まれている平均の相互作用との相違，も一つはスピン-軌道相互作用のエネルギーである．後者は各電子のスピンと軌道運動との間の相互作用のエネルギーで次の形をとる．

$$\sum_n \xi(r_k)\mathbf{L}_k\cdot\mathbf{S}_k \qquad (47.13)$$

ここで $\mathbf{L}_k$ は k 番目の電子の軌道角運動量の演算子 $\mathbf{r}_k\times\mathbf{p}_k$ で，§27 で導入された $\mathbf{J}$ 演算子と同じ性質をもっている；すなわち $\mathbf{L}_k^2, L_{kz}$ の固有値は k 番目の電子の量子数 l および m_l を使って与えられて，それぞれ $l(l+1)\hbar^2$ および $m_l\hbar$ となる．$\mathbf{S}_k$ は k 番目の電子のスピン角運動量 $\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}_k$ で，これは §41 で導入された演算子である．関数 $\xi(r)$ は中心力場のポテンシャル・エネルギー $V(r)$ を使って次式で与えられる．[1)]

---

1) L. H. Thomas, *Nature*, **117**, 514 (1926) このエネルギーは相対論の結果であり，第XIII章では相対論的な項として導かれている．ただし，この項は電子のスピン軸の歳差運動から始めて求められた．この歳差運動はその一部は電磁的な原因によるもの (Larmor の歳差運動) であり，他の一部は相対論的運動学の結果として現われるもの (Thomas の歳差運動) である．

$$\xi(r)=\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr} \qquad (47.14)$$

これらの項を考慮する際に次のような仮定をおくことにしよう．摂動系の固有関数は，中心力場内での種々な配置に対する波動関数の一次結合になるわけであるが，それらの中には一つの配置を除けばそれ以外のすべての配置は無視しうるほど少ない程度にしか混っていない．(31.10) 式からわかるように，種々な配置に対応している無摂動系のエネルギー状態間の間隔に比べて，種々な配置の間をつなぐ摂動の行列要素が小さい場合は，明らかにこの仮定の成立する場合になっている．

(47.13) の和の中で，満たされた殻中のすべての電子を含む部分は零になることを示すことができる．なぜなら，関数 ξ は一つの殻中のすべての電子に対して同一でありかつ逆符号の m_l および m_s をもった電子についての和は打ち消しあうからである．結局，満たされた殻内の電子は無視することができ，和は残りの電子だけについてとっておけばよい．満たされた殻の外側に唯一つの電子しかないという場合は，アルカリ原子の基底状態および低い励起状態に関連して興味があるが，それについては次の節で稍々詳細に調べることにしよう．一応この節では，比較的一般的な場合の事情を極めて簡潔に考察することにする．ただし，その際常に，それぞれの原子状態は電子の唯一つの配位状態を基にして考えられるものと仮定しておく．

47-8 *LS* 結合の形式

中心力場近似では，一般に，同一の配置に属していて，かつ縮退しているいくつかの状態が存在する．これらの状態は個々の電子の量子数 m_l および m_s の指定の仕方で異なっている．複合スペクトルの理論といわれるものは，第一近似のオーダーで摂動エネルギーを対角化するような，適当に反対称化された波動関数の一次結合を決定し（§31 を見よ）かつ同時にそれに対応する摂動をうけたエネルギー準位を求めることに他ならない．

最も普通におこる状況では，これまで無視してきた静電的な項の方がスピン-軌道のエネルギーに比べて大きくなっている；これは **Russell-Saunders の場合** *Russell-Saunder's case*[1] とよばれている．同一配置の状態はハミルトニアンと可換な，したがって運動の恒量になっている（§24 を見よ）任意の力学変数の固有関数として分類する

1) H. N. Russell and F. A. Saunders, *Astrophys. J.*, **61**, 38 (1925).

ことができる．すべての摂動を考慮に入れた場合の真の運動の恒量に限れば，それらは電子の全パリティおよび全角運動量 **J**

$$\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}=\sum_k(\mathbf{L}_k+\mathbf{S}_k) \tag{47.15}$$

だけになる．原子の全体としての向きを指定する角は同時に **J** の成分の正準共軛変数になっているが，この種の変数は一つの孤立した原子のハミルトニアンには入ってこないから **J** は一つの運動の恒量になるのである．静電的な摂動は含めるがスピン-軌道のエネルギーは無視するという場合には，同じ議論を適用して，全軌道角運動量 **L** および全スピン角運動量 **S** がそれぞれ別々に運動の恒量になっていることを示すことができる．この近似ではたとえスピンに関係する力が作用していなくても，個々の $\mathbf{S}_k$ が運動の恒量である必要はない．というのは，反対称波動関数を使うことによってスピンが静電的なエネルギーと結びつくことになるからである（§41 のヘリウムの励起状態についての議論を見よ）．

一つの状態を量子数 J, L, S, M, M_L および M_S，によって指定することができる．これらの量子数は次の関係によって角運動量の演算子と結びついている．

$$\begin{aligned}\mathbf{J}^2&=J(J+1)\hbar^2, & J_z&=M\hbar\\ \mathbf{L}^2&=L(L+1)\hbar^2, & L_z&=M_L\hbar\\ \mathbf{S}^2&=S(S+1)\hbar^2, & S_z&=M_S\hbar\end{aligned} \tag{47.16}$$

スピン-軌道のエネルギーを無視した場合，静電エネルギーによって L の異なった状態が分離される；場合によっては，排他原理のために特定の S の値だけが許されることがある．他の 4 個の量子数の内の二つだけが独立であるから，一つの状態を指定するためには，LSM_LM_S か $LSJM$ かの組合わせのどちらかを使うことができる．この場合のハミルトニアンは，空間部分およびスピン部分の各々に関して別々に球対称性をもっているから，エネルギーは方向量子数 M_L および M_S に無関係なわけで，LSM_LM_S の表示では $(2L+1)(2S+1)$ の縮退状態があるわけである．与えられた L と S に対して，J および M で指定される状態は M_L および M_S で指定される状態の一次結合になっているから，$LSJM$ の表示でもやはり LSM_LM_S 表示と同じだけの縮退が現われるわけである．この種の一次結合は §28 で論じた Clebsch-Gordan の係数を用いて表わすことができる．このような表示では，個々の L_k がそれぞれに結合して全体の L をつくりまた個々の S_k が結合して全体の S をつくっているので，**LS 結合の形式** *LS coupling*

scheme とよばれている．

次にスピン-軌道エネルギーが含まれている場合を考えると，J および M はやはり運動の恒量になっているものの，L および S はもはや運動の恒量にはなっていない．しかし，L および S の異なった状態は静電エネルギーのために十分よく分離されていて，その結果スピン-軌道エネルギーによるこれらの混り合いは無視できると仮定する．この仮定は異なった配置は中心力場によって十分よく分離されていて，静電エネルギーによるそれらの混り合いは無視できるという以前の仮定に類似したものである．そうすると，$LSJM$ 表示で J の異なった状態はスピン-軌道エネルギーによってわかれることになる；ただし，エネルギーはやはり M に関係しないから，$2J+1$ 個の縮退状態がある．一つの Russell-Saunders 状態は普通 ${}^4D_{1/2}$ というふうな形で書き表わされている．ここで肩の添字は**多重度** ***multiplicity*** $2S+1$ であり，文字（この場合には大文字にする）はこの節の前半にのべた符号規則にしたがって L の値を示し，下の添字は J の値である；この例の場合には $S=\frac{3}{2}$，$L=2$ かつ $J=\frac{1}{2}$ である．$\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ だから，§28 の始めに論じた三角形の規則からわかるように，J は $L+S$，$L+S-1, \cdots |L-S|$ という数の中の唯一つだけをとり得ることになる．

47-9 選　択　則

Russell-Saunders の場合の選択則は §46 の議論を使って求めることができる．一つの遷移には唯一個の電子が含まれるだけだから，その結果 l の中の一つが一単位だけ変化することを通じて配置の変化がおこる；この場合，パリティも変化させる．電気双極子能率にはスピンが含まれていないし，また異なった L に対するスピン関数は直交するから（問題 4 を見よ），許容遷移においては S は変化しない．さらに，原子と輻射場との間の角運動量の保存ということから，J と L がそれぞれ 1 または 0 だけ変化することが必要になる．両者ともに $J=0$ になっている状態間の遷移は強く禁止されたものになる．

異なった多重度（したがって S の異なる）の状態間をむすぶ系間線（intersystem line）が現われることも時々ある．これは LS 結合が部分的に破れていることを示している．2537 Å のところの極めて強い水素の共鳴線は ${}^3P_1 \to {}^1S_0$ の一つの系間線である．この遷移は J, L，配置，パリティに関する限りでは許容遷移になっているが，S についての変化に関してはそうなっていない．この ${}^3P_1$ という状態はスピン-軌道エネルギー

によって，Jおよびパリティは同じであるが，それより高い一重項 ($S=0$) の状態と部分的に混合されて，その結果電気双極子遷移が可能になるのである．

47-10 *jj* 結合の形式

LS 結合に含まれている近似に正反対の近似は，スピン-軌道エネルギーが静電エネルギーに比べて大きいと仮定することである．静電エネルギーを無視すれば，各電子の状態は量子数としては nlm_lm_s によるよりも $nljm$ によって指定することができる．ただし $(\mathbf{L}_k+\mathbf{S}_k)^2=j(j+1)\hbar^2$，かつ $L_{kz}+S_{kz}=m\hbar$ である．これらの J の異なった状態はさらに静電エネルギーによって分かれることになる．

この場合は，個々の電子の軌道およびスピン角運動量が一緒に結合して j をつくっており，それらから状態が構成されるので **jj 結合の形式** *jj-coupling scheme* とよばれている．重い原子では，その大きな $V(r)$ のためにスピン-軌道エネルギー (47.13) が摂動として支配的になってくるため，この種の結合形式が主に問題になる．

48□アルカリ原子

アルカリ原子の基底状態の配置は一連の満たされた殻とそれにつづく一個の s 電子から構成されている，したがって $^2S_{\frac{1}{2}}$ である．内側の稀ガス配置の部分は非常に安定しているから極めて高く励起された場合を除けば原子のすべての励起状態は価電子だけに関係しているとしておいてよい．したがってアルカリ原子は球対称な非クーロンポテンシャル・エネルギー $V(r)$ の中の単一の電子の運動という模型を使って極めて良い近似で取扱うことができるわけである．この節では，ある外部磁場がない場合とある場合のエネルギー準位および許容遷移の強度を計算することにする．

48-1 二重項の分離

アルカリ原子の電子配置は一対の量子数 nl だけで指定することができる．電子が一個しか存在しないから，前節でのべた静電的な摂動項は現われない．外場がないときのハミルトニアンは，スピン-軌道エネルギー (47.13) を含めて次のようになる．

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)+\xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \tag{48.1}$$

ただし，$\xi(r)$ は (47.14) で与えられる．§47 の場合と同様に，スピン-軌道エネルギーによって生じる異なった配置の混合は無視してこの項をそれぞれの配置の内部の $m_l m_s$ 縮退を除く摂動と見なすことにする．価電子の全角運動量 $\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ は運動の恒量になっている (問題5を見よ)．したがって各状態を指示するのに $m_l m_s$ の代わりに jm を使うことができる．ただし，$\mathbf{J}^2=j(j+1)\hbar^2$ かつ $J_z=m\hbar$ である．j の異なる状態は異なったエネルギーをもっているが，それでもなお m による $(2j+1)$ 重の縮退が残っている．この m の縮退を磁場によって取り除くことはこの節の後半で論じることにする．

j が異なる状態間のエネルギーの違いは (48.1) の $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ 項によるもので，この項の期待値または対角線要素から求めることができる [(31.8) 式を見よ]．次の演算子の等式が成立する．

$$\mathbf{J}^2=(\mathbf{L}+\mathbf{S})^2=\mathbf{L}^2+\mathbf{S}^2+2\mathbf{L}\cdot\mathbf{S} \tag{48.2}$$

l, j および s はすべて良好な量子数 (ただし一電子に対して $s=\frac{1}{2}$ にきまる) になっているから，(48.2) は $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ の対角線要素について解くことができて

$$\langle lj|\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}|lj\rangle=\tfrac{1}{2}[j(j+1)-l(l+1)-\tfrac{3}{4}]\hbar^2 \tag{48.3}$$

となる．そこでもしも l が 0 と異なるものとすれば，j は $l+\frac{1}{2}$ か $l-\frac{1}{2}$ かのいずれかをとり得る．したがって，$\xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ から生じる一次の摂動エネルギーは，それぞれの場合について次のようになる．

$$\left.\begin{array}{ll}\frac{1}{2}l\zeta_{nl} & j=l+\frac{1}{2},\\ -\frac{1}{2}(l+1)\zeta_{nl} & j=l-\frac{1}{2},\end{array}\right\}l>0\ \text{の場合} \tag{48.4}$$

$$\zeta_{nl}\equiv\hbar^2\int_0^\infty|R_{nl}(r)|^2\xi(r)r^2dr$$

ただし，$R_{nl}(r)$ は無摂動固有関数の規格化された動径部分である．$V(r)$ は引力のポテンシャル・エネルギーを表わしているから，(47.14) で与えられる $\xi(r)$ は正，したがって ζ_{nl} も正になる．したがって高い j をもつ状態が高いエネルギーをもつことが (48.4) からわかる．この一対の状態は**二重項** *doublet* とよばれている；二重項の構造をもっていることはアルカリ原子の適度に励起されたすべての準位に通じる特性である．ただし，$l=0$ の準位は除外例でこの準位では j は $\frac{1}{2}$ をとりうるだけである．

二重項の分かれ方は動径関数がわかっていれば (48.4) から計算することができる．動径関数として (16.24) 式で与えられている水素原子的な波動関数を用いかつ

$V(r)$ が $-Ze^2/r$ のクーロム型をしていると仮定すれば，この分れ方の n についての変化を大体推定することができる．(47.14) と (48.4) にこの置き換えを行なって，Laguerre の陪関数に対する母関数 (16.21) を使えば，次の結果が得られる．

$$\zeta_{nl}=\frac{\hbar^2Ze^2}{2m^2c^2}\int_0^\infty\frac{1}{r}R_{nl}{}^2(r)dr$$
$$=\frac{e^2\hbar^2Z^4}{2m^2c^2a_0{}^3n^3l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \tag{48.5}$$

この結果は $l>0$ に対してのみ成立する；また $r=0$ での $\xi(r)$ の特異性のために ζ_{n0} に対する積分はそこで発散することになり，その結果摂動近似は正しくなくなる．(48.4) と (48.5) から二重項の分離は n^{-3} に比例することが結論されるが，この結果は観測と極めてよく一致している．二重項の分離の絶対値とか l によるその変化とかは到底この種の簡単な理論では与えられない．それは，Z の有効値を算定するのが難しいことおよびそれが軌道の貫徹効果によって l によって著しく変化するからである．[1]

48-2 二重線の強度

次に許容二重線 ${}^2P_{\frac{3}{2}}\rightarrow{}^2S_{\frac{1}{2}}$ および ${}^2P_{\frac{1}{2}}\rightarrow{}^2S_{\frac{1}{2}}$ の二本の線の相対的な強度を計算することにする．ただし，この二つの励起された ${}^2P$ 状態に対する動径波動関数は同じものであるという仮定をしておく．この型の遷移はアルカリスペクトル中の主系列を生じる．もしも二つの P 状態が等しい確からしさで占められているとすれば (45.22) 式から自発的な遷移の確率，すなわち観測される強度は双極子能率の行列要素の2乗に比例することになる．[2]

${}^2P$ の二つの励起状態と ${}^2S$ の基底状態が電子の角座標およびスピン座標によってどのように変化するかということは，四つの球面調和関数 $Y_{1,1}(\theta,\phi)$，$Y_{1,0}(\theta,\phi)$，$Y_{1,-1}(\theta,\phi)$ および $Y_{0,0}(\theta,\phi)$ と二つのスピン波動関数 (+) および (−) の積の一次結合で，$\mathbf{J}^2$ と J_z の固有関数になっているものを見つけることによって答えられる（角関数およびスピン関数の議論については §14 および §41 を見よ）．この種の一次結合

---

1) 水素のエネルギー準位に対するスピン-軌道相互作用の影響は次章で相対論的な正確な計算の一部として求められている．

2) 上位の二つの状態の間のエネルギー差は小さいので (45.22) の ω^3 因子は強度の比には問題になるほどの影響を与えない．

は (28.13) に与えられている Clebsch-Gordan 係数から求めることができて，次のようになる．

$$
\begin{array}{lll}
{}^2P_{\frac{3}{2}}\left\{\begin{array}{l} m=\frac{3}{2} \\ \quad\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \\ -\frac{3}{2} \end{array}\right. & \begin{array}{l} (+)Y_{1,1} \\ 3^{-\frac{1}{2}}[2^{\frac{1}{2}}(+)Y_{1,0}+(-)Y_{1,1}] \\ 3^{-\frac{1}{2}}[2^{\frac{1}{2}}(-)Y_{1,0}+(+)Y_{1,-1}] \\ (-)Y_{1,-1} \end{array} & \\
{}^2P_{\frac{1}{2}}\left\{\begin{array}{l} m=\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{array}\right. & \begin{array}{l} 3^{-\frac{1}{2}}[-(+)Y_{1,0}+2^{\frac{1}{2}}(-)Y_{1,1}] \\ 3^{-\frac{1}{2}}[\ \ (-)Y_{1,0}-2^{\frac{1}{2}}(+)Y_{1,-1}] \end{array} & (48.6) \\
{}^2S_{\frac{1}{2}}\left\{\begin{array}{l} m=\frac{1}{2} \\ -\frac{1}{2} \end{array}\right. & \begin{array}{l} (+)Y_{0,0} \\ (-)Y_{0,0} \end{array} &
\end{array}
$$

(48.6) の波動関数を使って $x=r\sin\theta\cos\phi$, $y=r\sin\theta\sin\phi$ および $z=r\cos\theta$ の行列要素を計算することができる．(48.6) に付随する動径関数はすべて同一であると仮定すれば，行列要素の積分の動径部分は一つのどれにも共通な因子になる．(14.16) の θ および ϕ による Y の具体的な表式を利用すれば行列要素の積分の角部分は容易に評価できる．[1] スピン関数の積は $(+)^\dagger(+)=1$, $(-)^\dagger(+)=0$ 等の簡単な規則に従う．このようなやり方で，次に指示してあるいろいろな行列要素の大きさの自乗を求めると，それらは共通の動径部分の1/18を単位にして次のような値をとる．

$$
\begin{array}{llll}
{}^2P_{\frac{3}{2}}\to{}^2S_{\frac{1}{2}}\left\{\begin{array}{lll} m=\frac{3}{2}\ \text{から} & m=\frac{1}{2}\ \text{へ} & |x|^2=|y|^2=3,\quad |z|^2=0 \\ \quad\frac{3}{2} & -\frac{1}{2} & |x|^2=|y|^2=|z|^2=0 \\ \quad\frac{1}{2} & \quad\frac{1}{2} & |x|^2=|y|^2=0,\quad |z|^2=4 \\ \quad\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & |x|^2=|y|^2=1,\quad |z|^2=0 \end{array}\right. & (48.7) \\
{}^2P_{\frac{1}{2}}\to{}^2S_{\frac{1}{2}}\left\{\begin{array}{lll} m=\frac{1}{2}\ \text{から} & m=\frac{1}{2}\ \text{へ} & |x|^2=|y|^2=0,\quad |z|^2=2 \\ \quad\frac{1}{2} & -\frac{1}{2} & |x|^2=|y|^2=2,\quad |z|^2=0 \end{array}\right. &
\end{array}
$$

$m=-\frac{1}{2}$ および $m=-\frac{3}{2}$ から出発する遷移に対しても同様な結果が得られる；ともかく，これらの結果は §46 の m について選択則を確かめるものである．

四つの ${}^2P_{\frac{3}{2}}$ の状態の各々から生じるすべての線の強度の和は，先の単位で6に等しくなっていることが (48.7) からわかる．この種の和が等しいことは当然予想されるべきことである．なぜならば，m の四つの値というのは角運動量の向きで異なってい

1) $l>1$ の Y_{lm} 関数が含まれる一般の場合には，J. A. Gaunt によって与えられた三つの球関数の積の積分に対する公式を利用すると計算が容易になることがしばしばある；Condon-Shortley (上掲書) の176頁を見よ．Gaunt の公式は Clebsch-Gordan 係数を用いて導き出すことができる．

るだけであり，この違いはスペクトルの強度に強響を与えるはずがないからである．ところが二つの $^2P_{\frac{1}{2}}$ 状態の各々からの全強度もまた6に等しくなっている．与えられた L および S からつくられる各状態からの全強度が等しくなることは LS 結合の一般的な性質の一つである；この性質から，m に関して縮退しているすべての状態からの強度である観測された強度が $2J+1$ に比例することになる.[1] ここで考えられた例では，二重項の二つのスペクトル線は比が 2：1 の強度をもつことになる，このことはアルカリの最低の二重項について観測されているが，高く励起された二重項に対しては，この比は 2を上廻ることになる．これはスピン-軌道エネルギーが実際には異なった配置（j は同じで n の異なる ^2P 状態）を混合することになるからである；つまり，混合される割合が二つの j の値に対して異なってくるので，二つの動径関数は同じではなくなるのである．強度の高い最低の ^2P 状態に強度の低い上位の状態が少し混り合っても殆ど影響はないけれども，反対の場合には二重項の強度比は大きく影響をうけることになる.[2]

48-3 磁場の効果[3]

次にアルカリ原子のエネルギー準位および遷移の強度に対する磁場の効果を考える．§31 で議論しておいたように，一定磁場 $\mathbf{H}$ はベクトルポテンシャル

$$\mathbf{A}=\tfrac{1}{2}\mathbf{H}\times\mathbf{r} \tag{48.8}$$

によって表わすことができ，荷電 $-e$ の1個の電子の軌道運動に付随する余分のエネルギーは

$$\frac{e}{2mc}\mathbf{H}\cdot\mathbf{L}+\frac{e^2}{8mc^2}H^2r^2\sin^2\theta \tag{48.9}$$

となる．ここで $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ で θ は $\mathbf{r}$ と $\mathbf{H}$ の間の角である．

電子はさらにスピンの軸の方向に固有の磁気能率をもっている．この能率の大きさは以下に示す Zeeman 効果に関する実験と理論との比較によって決定され，Dirac の電子の相対論的理論から導かれる値と一致している（第XIII章）；その結果は電子のスピン角運動量の $-e/mc$ 倍すなわち $-e\hbar/2mc$ になる.[4] この値は荷電と質量密度との比

1) Condon-Shortley（前掲書），238頁.
2) E. Fermi, *Z. Physik*, **59**, 680 (1929).
3) W. Heisenberg and P. Jordan, *Z. Physik*, **37**, 263 (1926).
4) $e\hbar/2mc$ という量は**ボーア磁子** ***Bohr magneton*** とよばれており，0.927×10^{-20} erg/oersted に等しい.

が一定の古典的な荷電分布のもつ磁気能率と角運動量との比の2倍になっている．結局磁気能率の演算子は $-(e/mc)\mathbf{S}$ となり，このために磁場内で付け加わるエネルギーは

$$\frac{e}{mc}\mathbf{H}\cdot\mathbf{S} \tag{48.10}$$

である．

(48.9) と運動エネルギーとの比は普通実験室で用いられている強さの磁場に対しては極めて小さい（問題6を見よ）．したがって，波動関数およびエネルギー準位に対する H の項の効果を求めるのに摂動論を用いてよいことになる．大抵の場合には，H について一次の項だけを考慮しておけば十分である．しかしながら，磁場が非常に強くかつ軌道が大きくなるときには，二次の項が問題になりうる（以下の二次の Zeeman 効果の議論を見よ）．なお，エネルギーの中の H^2 に比例している項からは磁化率を求めることもできる．

48-4 弱い磁場の場合

さしあたっては，H についての一次の効果だけを考えることにする．この場合には，(48.1) のハミルトニアンは，(48.9) および (48.10) を使って次のようになる．

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)+\xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}+\epsilon(L_z+2S_z),\quad \epsilon\equiv\frac{e\mathrm{H}}{2mc} \tag{48.11}$$

ただし，磁場は z-軸の方を向いているとしてある．ところで，(48.11) の最後の項がスピン-軌道エネルギーに比較して小さいか大きいかにしたがって，弱い磁場と強い磁場の場合とに分類することにする．普通，場の弱い場合を **Zeeman 効果** *Zeeman effect* と称し，場の強い場合を **Paschen-Back 効果** *Paschen-Back effect* と称している．ただし，Zeeman 効果という言葉はすべての磁気的効果を含むものとして用いられることが少なくない．

場の弱い場合には，$\mathbf{J}^2$ と J_z の固有関数になっている (48.6) の波動関数を利用することができる．容易に証明されるように，磁気的エネルギー $\epsilon(L_z+2S_z)=\epsilon(J_z+S_z)$ は j の異なった状態間の行列要素はもっているが，j が同じで m の異なった状態間の行列要素はない．j の異なる状態のエネルギーの間隔はかなり大きいという理由で，前者を無視する．そうすれば，磁気的エネルギーは各々の j に対して m に関しては対角型になっており，(48.6) の各々の状態のエネルギーはその状態に対する期待値だけず

れることになる．この場合はそれぞれ J_z が対角型になっており，その期待値は $m\hbar$ である．そこでたとえば，$m=\frac{1}{2}$ をもつ $^2P_{\frac{3}{2}}$ 状態に対する S_z の期待値は，(41.5) とスピン関数および Y 関数の規格直交性を使って次のようになる．

$$\iint 3^{-\frac{1}{2}}[2^{\frac{1}{2}}(+)^\dagger Y^*_{1,0}+(-)^\dagger Y^*_{1,1}]\tfrac{1}{2}\hbar\sigma_z 3^{-\frac{1}{2}}[2^{\frac{1}{2}}(+)Y_{1,0}+(-)Y_{1,1}]\sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$=\frac{\hbar}{6}\iint[2^{\frac{1}{2}}(+)^\dagger Y^*_{1,0}+(-)^\dagger Y^*_{1,1}][2^{\frac{1}{2}}(+)Y_{1,0}-(-)Y_{1,1}]\sin\theta\, d\theta\, d\phi$$

$$=\frac{\hbar}{6}(2-1)=\frac{\hbar}{6}$$

結局，この状態の磁気的エネルギーは $\epsilon\hbar(\frac{1}{2}+\frac{1}{6})=\frac{2}{3}\epsilon\hbar$ である．この結果および (48.6) の他の状態に対する同様な結果は **Landé の g 因子** *Landé g facfor* を使って次のように表わすことができる；すなわち磁気的エネルギーは

$$\epsilon\hbar m g$$

ただし，$^2P_{\frac{3}{2}}$ に対しては $g=\frac{4}{3}$　　$^2P_{\frac{1}{2}}$ に対しては $g=\frac{2}{3}$

$^2S_{\frac{1}{2}}$ に対しては $g=2$　　(48.12)

場の弱い場合の遷移強度は (48.7) そのままで与えられている．§46 の議論によれば m が 1 だけ変化する遷移による輻射は場の方向で見れば円偏光になっており，xy 平面では場の方向に垂直の線偏光になっている；これらは σ 成分とよばれている（この名称はドイツ語での直交線分の意の *senkrecht* による．）遷移に際して m が変化しない場合には，場の方向には輻射が現われず，xy 平面でみれば場に平行に偏っている（π 成分）．xy 平面で観測すれば π 成分の強さは (48.7) の $|z|^2$ に比例し，σ 成分の強さは $|x|^2$ か $|y|^2$ か（ただしその和ではない）に比例している．

48-5　強い磁場の場合

(48.11) で磁気的エネルギーがスピン-軌道エネルギーに比較して大きい場合に，磁場が強いといわれる．この場合にはある与えられた nl をもつ配置を指定するには (48.6) のように j と m とによるよりも，m_l と m_s とによる方が都合がよい．この表示では磁気的エネルギーは対角型になっており，その値は

$$\epsilon\hbar(m_l+2m_s) \qquad (48.13)$$

となる．さし当りスピン-軌道エネルギーを無視するものとすれば，(48.6) に対応する 8 個の波動関数およびそれらのエネルギーのずれ (48.13) は次のようになる．

$$
\begin{array}{ll}
{}^2P\left\{\begin{array}{ll}
(+)Y_{1,1} & 2\epsilon\hbar \\
(+)Y_{1,0} & \epsilon\hbar \\
(+)Y_{1,-1} & 0 \\
(-)Y_{1,1} & 0 \\
(-)Y_{1,0} & -\epsilon\hbar \\
(-)Y_{1,-1} & -2\epsilon\hbar
\end{array}\right. \\
{}^2S\left\{\begin{array}{ll}
(+)Y_{0,0} & \epsilon\hbar \\
(-)Y_{0,0} & -\epsilon\hbar
\end{array}\right.
\end{array}
\tag{48.14}
$$

磁場が非常に強いような事象では，スピン-軌道エネルギーを（48.14）の波動関数に関する摂動として取扱うのが最も簡単である．ここではその代りに，磁気的およびスピン-軌道のエネルギーのすべての相対的な大きさを含んでいる一般の場合を考える．このためには，（48.11）の最後の二つの項の行列を（48.6）かまたは（48.14）のいずれかの表示で取扱ってゆけばよい．§31 の議論によれば，この行列の固有値はエネルギー準位になっており，行列を対角化する変換からは波動関数が与えられることになる．（48.14）から出発することにすると，すぐ気がつくようにここの2個の ^2S 波動関数は（48.6）の $^2S_{\frac{1}{2}}$ 関数と同一のものである．スピン-軌道エネルギーはこの状態相互間のずれを生じることがないから，これら二つの状態に関してはスピン-軌道エネルギーの効果を無視することにする；磁場によるエネルギーのずれは $\pm\epsilon\hbar$ になる．同様に，6個の ^2P 波数関数中の最初と最後のものは $m=\pm\frac{3}{2}$ をもつ（48.6）の $^2P_{\frac{3}{2}}$ 関数と同一のものである；それらのエネルギーは $\frac{1}{2}\zeta\pm2\epsilon\hbar$ である．ただし ζ は（48.4）で与えられるものである．

残りの4個の ^2P 波動関数を $m=m_l+m_s$ が $\frac{1}{2}$ に等しいかあるいは $-\frac{1}{2}$ に等しいかに応じた対に組み合せる．これら二対の中の一つだけを考えれば十分である．たとえば $m=\frac{1}{2}$ の組：$(+)Y_{1,0}$ と $(-)Y_{1,1}$ をとる．これらの二つの状態で指定される表示での磁気的およびスピン-軌道のエネルギーの行列は（27.26）の角運動量行列を使えば求められて

$$
\begin{bmatrix} \epsilon\hbar & 2^{-\frac{1}{2}}\zeta \\ 2^{-\frac{1}{2}}\zeta & -\frac{1}{2}\zeta \end{bmatrix}
\tag{48.15}
$$

となる．（22.21）の方程式の議論と同じ筋道をたどれば，行列（48.15）の固有値は次の永年方程式を解いて求められることになる．

$$\begin{vmatrix} \epsilon\hbar-\lambda & 2^{-\frac{1}{2}}\zeta \\ 2^{-\frac{1}{2}}\zeta & -\frac{1}{2}\zeta-\lambda \end{vmatrix} = \lambda^2+(\tfrac{1}{2}\zeta-\epsilon\hbar)\lambda-\tfrac{1}{2}\zeta(\epsilon\hbar+\zeta)=0$$

このようにして，これら二つの状態のエネルギーのずれとして次のものを得る．

$$\lambda_{\pm}=\tfrac{1}{2}[\epsilon\hbar-\tfrac{1}{2}\zeta\pm(\epsilon^2\hbar^2+\epsilon\hbar\zeta+\tfrac{9}{4}\zeta^2)^{\frac{1}{2}}] \tag{48.16}$$

弱い場および強い場の極限では，(48.16) の上および下の符号の解から

$$\begin{aligned} &\frac{\epsilon\hbar}{\zeta}\to 0 \text{ の場合} \quad \lambda_+\to\tfrac{1}{2}\zeta+\tfrac{2}{3}\epsilon\hbar \text{ かつ } \lambda_-\to-\zeta+\tfrac{1}{3}\epsilon\hbar \\ &\frac{\zeta}{\epsilon\hbar}\to 0 \text{ の場合} \quad \lambda_+\to\epsilon\hbar \qquad \text{ かつ } \lambda_-\to-\tfrac{1}{2}\zeta \end{aligned} \tag{48.17}$$

(48.17) 式から，(48.16) で上の符号をとったものは場の弱いときの $j=\frac{3}{2}$，$m=\frac{1}{2}$ の状態および場の強いときの $m_l=0$，$m_s=\frac{1}{2}$ の状態に対応していることがわかる．同様に，(48.16) の下の符号をとればそれは場の弱いときの $j=\frac{1}{2}$，$m=\frac{1}{2}$ の状態および場の強いときの $m_l=1$，$m_s=-\frac{1}{2}$ の状態に対応している．

遷移強度はこの一般の場合には $\xi(r)\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}+\epsilon(L_z+2S_z)$ の固有関数を使って x, y, z の行列要素を計算すれば求められる．これらの固有関数は (48.14) の第一，第六，第七および第八の関数および (48.14) の残りの4個の関数の一次結合で，それらは (48.15) を対角化する変換行列から求められる．

48-6 二次の Zeeman 効果

磁場が非常に強くかつ軌道が大きい，いい換えれば n の値が大きい場合には，H について二次の項の効果が問題になってくる．(48.5) から明らかなように，大きな n に対してはスピン-軌道エネルギーは極めて小さくなりエネルギーのこの部分を全然無視してしまって得られる近似が有効になる．この場合には電子のスピンはハミルトニアンと可換であり，したがって m_s は運動の恒量となりスピンは考えに入れないでよいことになる．この場合 (48.11) のハミルトニアンは次のもので置き換えられる．

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V(r)+\epsilon L_z+\tfrac{1}{2}m\epsilon^2r^2\sin^2\theta \tag{48.18}$$

$L_z=-i\hbar\partial/\partial\phi$ は (48.18) と可換であるから，m_l は良好な量子数になっており，ϵL_z の項の効果としては各々のエネルギー準位が大きさ $\epsilon\hbar m_l$ だけずれることにななる．結局大きな n に対しては，(48.18) の最後の項 $H'\equiv\frac{1}{2}m\epsilon^2r^2\sin^2\theta$ の効果を，m_l と m_s

の特定の値について問題にするだけで十分である.[1]

§16 の議論の結論によれば, 水素原子の有効半径はほぼ n^2 に比例してくる. アルカリ原子の n の大きい状態に対しては, $V(r)$ は実際上クーロン型になっており, 波動関数としては水素原子型のものに極めて近い. したがって H' は大体 n^4 にしたがって大きくなってゆく. このことは十分大きな n に対しては n はもはやよい量子数でないことを意味する. n が比較的小さいところでは, H' は l の違った値の間の行列要素をもち, しかもこれらの状態の無摂動エネルギーは互いに接近しているため (これらの状態はもともと l の最小値に対する波動関数が内部の満たされた殻を貫通するという理由だけで縮退することができないのである), l はよい量子数であることはできない. この領域では, 摂動エネルギー準位は, n, m_l および m_s の与えられた値に対して H' の行列を対角化して求めることができる. このとき, $n-|m_l|$ 個の行および列は l で標示される. 行列 H' の構造は Gaunt の公式 (508頁の脚注を見よ) を使って推定することができる; $\sin^2\theta$ は 0 次と 2 次の球関数を使って表わすことができるから, $H_{ll'}'$ の零にならない行列要素は $l-l'=0$, ± 2 のところだけになる. したがって (たとえば $m_l=0$ とすると) H' 行列は次の形をもつ.

$$\begin{bmatrix} H'_{00} & 0 & H'_{02} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & H'_{11} & 0 & H'_{13} & 0 & \cdots \\ H'_{20} & 0 & H'_{22} & 0 & H'_{24} & \cdots \\ 0 & H'_{31} & 0 & H'_{23} & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & H'_{42} & 0 & H'_{44} & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \end{bmatrix} \tag{48.19}$$

(48.19) の行列は 2 個の独立な行列に同等である. 一つは偶数の l に, もう一つは奇数の l に対応するもので, それぞれはおよそ $\frac{1}{2}n$ の行および列をもっている. n が大きいときこれらの行列を対角化することはとても面倒なことになるものと思われる. しかし, その結果得られるエネルギー準位は互いに非常に接近していて, 分光学的にも分離することができないものである以上, 個々の準位を決定しなければならない理由は殆どないのである. 観測できるのは ^2S の基底状態 ($l=0$) と (48.19) の対角化によって得られる一群の状態の間の遷移の集りなのである; この集りはひろがった一本の "線" であるようにみえる. 許容遷移は (48.19) の固有関数のそれぞれに m_l が 0 または ± 1 の

1) L. I. Schiff and H. Snyder, *Phys. Rev.*, **55**, 59 (1939).

値だけをとりうるように混合している $l=1$ の状態によってのみ起こりうるのである．このことから，以下に示すように，H' を対角化しないでこの線の重心の位置と2乗平均としての線幅を求めることが可能になる．

H' が実の行列になるように無摂動波動関数を選んでおくことができる．そうすれば，H' を対角化するユニタリー行列 S は実数にすることができ，(22.24) または (23.12) を次のように書くことができる．

$$SH'S^{\dagger}=E \tag{48.20}$$

ただし，ここの $S^{\dagger}$ は S の転移行列で E は対角行列である．行列要素を使って書けば，この方程式は

$$\sum_{k,l} S_{ik}H'_{kl}S_{jl}=E_i\delta_{ij}$$

となる．エネルギー固有値 E_i に対応する新しい固有関数 u_i は (23.6) によって無摂動系の波動関数 v_l を使って次のように書ける．

$$u_i=\sum_l S_{il}v_l$$

ここで，この一群の状態に含まれているエネルギーの小さな範囲を通じては輻射遷移の確率のエネルギーによる変化を無視できるものとすれば，遷移確率は各 u_i 中の v_1 の分量の2乗すなわち $S_{i1}{}^2$ に比例する．したがって各エネルギー準位 E_i には $S_{i1}{}^2$ に比例する重みをつけておかねばならない．摂動エネルギー準位群の重心は，重みをつけた平均として (48.20) から逆の関係として得られる $H'=S^{\dagger}ES$ を使って次式で与えられる．

$$E_{\text{平均}}=\sum_i E_iS_{i1}{}^2=H'_{11}$$

同様なやり方で，2乗平均としてのこの線の幅は次のようになる．

$$\begin{aligned}\sum_i (E_i-E_{\text{平均}})^2S_{i1}{}^2&=\sum E_i{}^2S_{i1}{}^2-E^2{}_{\text{平均}}\\&=\sum_l H'_{1l}{}^2-E^2{}_{\text{平均}}=H'_{13}{}^2\end{aligned}$$

結局，計算する必要があるのは H' の行列の中二つだけである．明らかに，($\epsilon\hbar m_l$ の因子を別にすれば) この線のずれおよび幅は H^2 に比例する．

49□分　　　子

分子は構造という点ではかなりの程度に，原子よりもさらに複雑になっており，それに

応じて量子力学の分子に関する問題への定量的な応用においてこれまでにあげられてきた成果は原子に関する問題の場合に比べて乏しいのである．この節では分子のエネルギー準位の性質についての一般的説明にひきつづき，水素分子についての簡単なしかし具体的な計算および二原子分子の幾分より一般的な取扱いを示すことにする．[1)]

49-1 エネルギー準位の分類

すべての分子についての近似の基礎になっている簡単化の特徴は原子核の質量の電子質量に対する比が大きいという点にかかっている．すぐ後でわかるように，このことは核の運動に付随したエネルギーが核の周りの電子の運動に付随しているエネルギーよりもずっと小さいことを意味する．運動の周期は $\hbar$ をそのエネルギーで割った程度のオーダーであるから，上の事情に応じて核の周期は電子の周期より長くなる．したがって，電子の運動を計算する際には核を固定されたものと見なすことはよい近似になっている．さらにその他に，電子はそれぞれの瞬間での核の空間的配置に対しては定常的運動をしているという仮定（断熱近似）のもとで，核運動を計算することができる．

分子中の核は完全につぶれた構造と完全に分散した構造の中間のどこかに当る一つの安定した平衡的配置をもっているものと予想される（つぶれた状態は核が正の荷電をもち短い距離では互いに反撥し合う以上不安定である．また分散した状態も分子が存在する以上最も安定な状態にはならない）．したがって核の運動は，準剛体的な平衡にある空間的配置の併進運動と回転および平衡の近傍での核の内部振動の三つに分離することができる．原子の場合と同様に併進運動は一個の自由粒子の運動と同一で［(16.5)の議論をみよ］．何ら非古典的な特徴をもつものでない．

結局，分子のエネルギー準位は**電子的** *electronic*，**振動的** *vibrational* および**回転的** *rotational* の三つのタイプに分離されるということになり，これらの大きさの相対的なオーダーを評価することが次の問題になる．分子は一次元的な拡り a をもつものと考える．まず，価電子（一つの原子核に近いある内部の殻に束縛されている電子ではなく

---

1) より詳細な議論については次のものを見よ：G. Herzberg, "Molecular Spectra and Molecular Structure" 2d ed. (Van Nostrand, Princeton N. J., 1950)；L. Pauling and E. B. Wilson, Jr., "Introduction to Quantum Mechanics" (McGraw-Hill, New York, 1935)；［邦訳あり前出］；J. C. Slater, "Quantum Theory of Molecules and Solids," vol. 1 (McGraw-Hill, New York, 1963).

て，大体分子の体積全体を占めている電子）の運動に伴っているエネルギー E_e は，m を電子質量として $\hbar^2/ma^2$ のオーダーである．このことは，電子の運動量の不確定性が少なくとも $\hbar/a$ のオーダーなので，その最小の運動エネルギーが $\hbar^2/ma^2$ であることに注意すれば，§9 の始め近くで与えたような議論によって推論される．したがって，

$$E_e\sim\frac{\hbar^2}{ma^2} \tag{49.1}$$

となる．2～3オングストローム単位というオーダーの a の値に対してはこのエネルギーはスペクトルの可視部および紫外部の遷移の振動数に相当している．

振動エネルギーを評価するには，各基準振動を質量M，力の常数 K_0 をもつ一つの調和振動子とみなす．Mは標準的な核の質量のオーダーのものとしよう．K_0 の方は基準振動の方向での分子の大きさ a 程度の変位が電子エネルギー E_e のオーダーのエネルギー変化を生じることを注意すれば評価できる．なぜならば，このような大きな変位は電子波動関数の形を実質的に変えてしまうような結果を生じるはずだからである；その意味で $K_0\sim E_e/a^2$ とおく．したがって (13.8) の関係から振動の中で十分低い基準振動に伴うエネルギー E_v については，(49.1) を利用して

$$E_v\sim\hbar\left(\frac{K_0}{M}\right)^{\frac{1}{2}}\sim\frac{\hbar^2}{(mM)^{\frac{1}{2}}a^2}\sim\left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{1}{2}}E_e \tag{49.2}$$

となる．E_v は E_e と比べて大体百分の一程度に小さく，近赤外部の遷移に対応している．

回転のエネルギー E_r は分子の慣性能率から評価できる．分子の慣性能率は Ma^2 のオーダーであり，一方，回転運動の中十分低いモードのものの角運動量は $\hbar$ のオーダーであるものと予想されるから結局

$$E_r\sim\frac{\hbar^2}{Ma^2}\sim\frac{m}{M}E_e \tag{49.3}$$

これは E_v に比べて百分の一程度に小さく，遠赤外部の遷移に対応している．

電子的，振動的および回転的なエネルギー準位は何らかの形で小さな比 m/M（これは通常 10^{-3}～10^{-4} の範囲の値になる）に基づいた一つの近似において順々に高い次数の近似として求めることができるということは，(49.2)，(49.3) から当然期待してよいところである．実際にこの予想通りになっていることが Born と Oppenheimer

によって示された.[1] 彼等の用いた展開のパラメーターは，標準的な核の振動による変位と核間距離（これは a のオーダー）との比である．エネルギーが E_v で力の常数が K_0 の振動子の行なう変位は次のオーダーになる.

$$\left(\frac{E_v}{K_0}\right)^{\frac{1}{2}} \sim a\left(\frac{E_v}{E_e}\right)^{\frac{1}{2}}$$

したがって Born と Oppenheimer の用いた展開のパラメーターは

$$\left(\frac{E_v}{E_e}\right)^{\frac{1}{2}} \sim \left(\frac{m}{M}\right)^{\frac{1}{4}} \tag{49.4}$$

となる．このパラメーターを使えば，電子運動のエネルギーは0次近似に，振動のエネルギーは二次近似に，回転エネルギーは四次近似になり，一次および三次の近似でのエネルギーは零になるのである.

49-2 波動方程式

分子に対する時間を含まない Schrödinger 方程式は容易に書き下すことができて

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\nabla_i{}^2-\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}\nabla_j{}^2+V\right)\psi=E\psi \tag{49.5}$$

となる．n 個の電子と N 個の核があり，かつこれらからつくられるすべての対の間の静電的な相互作用の和を V としてある．明らかに核の運動エネルギーの項は（49.4）の展開パラメーターに関して四次の項になっている．これらの項を無視するとすれば，波動関数 ψ は核の座標 $\mathbf{R}_j$ をパラメーターとしてしか含まないことになって，（49.5）は空間中に固定された核に関しての電子の運動に対する $\mathbf{r}_i$ についての波動方程式になる．この場合，ψ は近似的に $u_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i)$ となり，かつそれはエネルギー固有値 $U(\mathbf{R}_j)$ に対応しているとする．そうすれば，核運動は $U(\mathbf{R}_j)$ を一つのポテンシャル関数とみなし，それを使って核波動関数 $w(\mathbf{R}_j)$ を求めれば解くことができる.

そこで，ψ を次の形に書いておく.

$$\psi(\mathbf{r}_i, \mathbf{R}_j)=u_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i)w(\mathbf{R}_j) \tag{40.6}$$

ただし u は次の方程式を満たすものである.

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{i=1}^{n}\nabla_i{}^2+V\right)u_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i)=U(\mathbf{R}_j)u_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i) \tag{49.7}$$

---

1) M. Born and J. R. Oppenheimer, *Ann. Physik*, **84**, 457 (1927)

核の配置のそれぞれに対して，$U(\mathbf{R}_j)$ は (49.7) の方程式の固有値として求められる．一般には，分子の異なった電子状態に対応する種々の解が存在することになる；その際注意しておかなければならないことは u と U が $\mathbf{R}_j$ に関して連続的に変化することが保証されていることである．この注意は系が縮退している場合には特に必要になる．

(49.6) を (49.5) に代入して，(49.7) を使えば次式を得る．

$$\left[-\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}\nabla_j{}^2+U(\mathbf{R}_j)\right]\psi=E\psi$$

これはまた次のように書き直すことができる．

$$u_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i)\left[-\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}\nabla_j{}^2+U(\mathbf{R}_j)-E\right]w(\mathbf{R}_j)$$
$$=\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}[w(\mathbf{R}_j)\nabla_j{}^2u_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i)+2\boldsymbol{\nabla}_jw(\mathbf{R}_j)\cdot\boldsymbol{\nabla}_ju_{\mathbf{R}_j}(\mathbf{r}_i)] \qquad (49.8)$$

ここで u の $\mathbf{R}_j$ による変化を無視すれば，(49.8) の右辺は落ちて，核運動に対する近似的な波動方式として次のものが得られる．

$$\left[-\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar^2}{2M_j}\nabla_j{}^2+U(\mathbf{R}_j)\right]w(\mathbf{R}_j)=Ew(\mathbf{R}_j) \qquad (49.9)$$

$\boldsymbol{\nabla}_ju$ の項を無視することは物理的には，平衡状態での核間距離に比べて核運動の振幅が小さいこと [つまり (49.4) のパラメーターの小さいこと] から導かれる；このことはまた核が運動する際，それに応じた波動関数の電子部分 u の変化が大きくないことを意味する．Born と Oppenheimer は余り高い振動および回転のモードが励起されない限り，この展開が正当化されうることを形式的に示したわけである．

49-3　水 素 分 子

以上の議論によって明らかなように，分子構造に関連して二つの別々の問題がおこってくる．第一は，電子波動関数および核座標についてのポテンシャル・エネルギー関数 $U(\mathbf{R}_j)$ を求めるために方程式 (49.7) を解くことである．第二は核運動に対する方程式 (49.9) を解くことである．第一の問題は最も簡単な場合についてのみ解くことができる．一例として，ここでは Heitler と London による水素分子に対する一つの近似解を，その概略についてしらべる[1]．それに引きつづいてポテンシャル・エネルギー U

1) W. Heitler and F. London, *Z. Physik*, **44**, 455 (1927).

に関して簡単な仮定を行なったときの二原子に対する方程式（49.9）の解を論じる．

水素分子の場合に（49.7）に入ってくる唯一の核座標 $\mathbf{R}_j$ は二つの水素原子核間の距離の大きさ R である．ハミルトニアンは（32.11）で与えられているものである（第27図を見よ）；ただし，R は $a_0=\hbar^2/me^2$ に比べて決して大きいとはいえない．したがって，（32.11）および（32.12）で考えられている近似はこの場合にはもはや使えない．にもかかわらず，基底状態にある2個の水素原子波動関数の単なる積を基にした近似的な波動関数が驚くほどよい結果を与えるのである．この結果に対する理由は交換縮退（§40を見よ）を考慮に入れることにある：つまり，電子1が核 A 上に，電子2が核 B 上にある状態と，電子1が核 B 上に，電子2が核 A 上にある状態とは縮退しているが，この縮退波動関数が両方とも一緒に用いられているためなのである．Heitler および London の仕事の新しい面というのは縮退している無摂動波動関数の適当な一次結合をとれば，個々別々の波動関数の場合よりもかなり低いエネルギーが与えられるということを認めたことである；この考えは現在分子における，**等極結合** ***homopolar binding*** の理論の基礎になっている．縮退のもつこの種の性質を指して**共鳴** ***resonance*** ということがよくある．つまり共鳴する（無摂動振動数が同じ）二つの古典的振動子が相互作用する場合，振動数が低くなった一つの基準振動を生じる（もとより高い振動数のモードもまた同時にできる）のと事情が類似だというわけである．つまり同様に，量子力学では二つの共鳴する（縮退している）状態がもとのエネルギーの固有値よりも低い値を生じるというわけである（この場合もやはり高い値もできる）[1]．勿論，2個以上の縮退した無摂動状態があってもよいし，また縮退は交換性のものとは限らなくてもよい．

49-4　ポテンシャル・エネルギー関数

水素分子に対する（49.7）式は次のようになる．

$$[H-U(R)]u_R(\mathbf{r}_1,\mathbf{r}_2)=0$$

$$H=-\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1{}^2+\nabla_2{}^2)$$

$$+e^2\left(\frac{1}{R}+\frac{1}{r_{12}}-\frac{1}{r_{1A}}-\frac{1}{r_{2B}}-\frac{1}{r_{1B}}-\frac{1}{r_{2A}}\right) \qquad (40.10)$$

1）　ここで共鳴という言葉を使うことと散乱に関連して §19 に現われた共鳴の使い方との関連は極めて稀薄なものにすぎない．

この $U(R)$ の近似計算の基礎としては次の近似的波動関数をとることにしよう.

$$u_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)=u_A(\mathbf{r}_1)u_B(\mathbf{r}_2)$$
$$u_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)=u_A(\mathbf{r}_2)u_B(\mathbf{r}_1) \tag{49.11}$$

ここで u_A および u_B はそれぞれ核 A および B を基準にした基底状態の水素原子波動関数 [(16.24) での u_{100}] である. まず最初に注意しなければならないことは (49.11) の u_1 および u_2 は異なった無摂動ハミルトニアンの固有関数であるため, §31 の縮退のある場合の摂動論は適用できないということである. この事情は, 二つの交換縮退波動関数が同一の無摂動ハミルトニアンの解になっていたヘリウム原子の場合と異なっている [(41.7) 式の議論を見よ].

しかしながら, §32 の変分法は使うことができる. その場合, 試験関数としては u_1 と u_2 の任意の一次結合

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)=u_1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)+Au_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \tag{49.12}$$

を採用することは自然である. ただし A は変分のパラメーターである. (49.12) を (32.5) に代入して次式を得る.

$$U(R)\leq\frac{(1+A^2)H_{11}+2AH_{12}}{1+A^2+2A\gamma}, \qquad \gamma\equiv\iint u_1u_2d^3r_1d^3r_2$$
$$H_{11}=H_{22}\equiv\iint u_1Hu_1d^3r_1d^3r_2, \qquad H_{12}=H_{21}$$
$$\equiv\iint u_1Hu_2d^3r_1d^3r_2 \tag{49.13}$$

これらの行列要素間の等式は, u が実, H はエルミチアンでかつ二つの電子に関して対称ということを思い出して (23.21) を利用すれば容易に確かめることができる.

H の行列要素と γ とは R に関係している. R には任意の特定の値を考えておくことにすれば, (49.13) の右辺の A についての微係数は

$$\frac{2(1-A^2)(H_{12}-\gamma H_{11})}{(1+A^2+2A\gamma)^2}$$

となり, これは $A\pm1$ で零になる. (49.13) の右辺は A が $-\infty$, 0, $+\infty$ のときには H_{11} に等しくなるから $A=\pm1$ の中の一つの点が U の極小点, 他の一つが極大点でなければならない. (49.13) の積分は関数表によって表わすことができる, その結果 H の最小の期待値は $A=+1$ で得られることになる:

$$\psi = u_1 + u_2$$
$$U(R) \leq \frac{H_{11} + H_{12}}{1+\gamma} \tag{49.14}$$

(49.14) で与えられている $U(R)$ に関する上界は二原子分子の核間のポテンシャル・エネルギー(第39図を見よ)に特有の一般的な形を示しており[1]，実験との一致も良好である．(49.14) の ψ は2個の電子の空間座標の入れ換えについて対称であるから，これには (41.6) の最後の式で与えられている反対称スピン関数を掛けておかねばならない．

水素分子の基底状態の対称性と §41 で調べたヘリウム原子の励起状態のそれとを物理的な見地から比較してみることは興味がある．排他原理のために電子は，もしも平行なスピンをもっておれば空間座標での状態は異なっていなければならないから，その結果お互いに遠ざかる傾向をもってくるわけである．たとえばヘリウムの $1s\,2s$ の励起状態ではこのために電子間の静電的な斥力がおさえられて，エネルギーは低くなる．したがってヘリウムの三重状態は同じ配置の一重状態よりも低い準位になる傾向をもつわけである(この事情は基底状態では異なってくる．というのは $1s^2$ の配置では一重状態しか存在し得ないからである)．一方，水素分子の基底状態では，最低エネルギー状態(最も結合の強い場合)は電子が二つの原子核の中間に集中している傾向を示す場合に得られている．これはその場合には電子間の斥力が各電子に対する両方の核の引力によって打消される方が多いからである．このようなことは，電子が同一の空間状態を占める場合，したがって逆平行のスピンをもつ場合に起こるわけである．このようにして一重項が安定な状態を導くことになる．

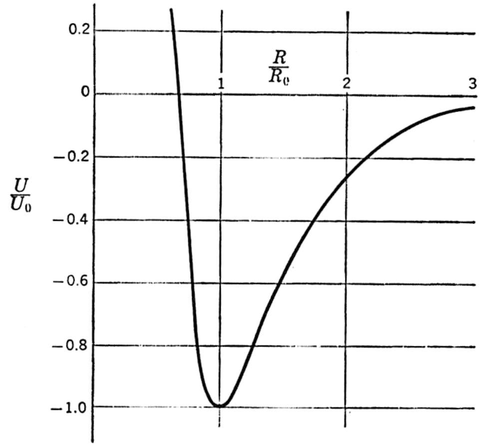
49-5 Morse の関数

ここで一般の二原子分子に話を転じて，核運動に対する方程式 (49.9) の解の性質を調べることにする．核の質量を M_1 および M_2 とし，それらの相対座標のベルトル $\mathbf{R}$ が極角座標 R, θ, ϕ をもつとすれば，相対運動に対する方程式は次のようになる [(16.5) 式を見よ]．

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2 + U(R)\right] w(R,\theta,\phi) = E w(R,\theta,\phi) \tag{49.15}$$

1) Pauling and Wilson, (前掲書) の 43a 節.

ただし，$M=M_1M_2/(M_1+M_2)$ は換算質量である．



第39図 Morse ポテンシャル (49.16)；ただし $a=\frac{1}{2}R_0$

経験によって知られているところにしたがえば，実際の二原子分子の最低の電子状態に対するポテンシャル関数は調節しうる三つのパラメーターを含む次のような解析的に簡単な形をもつ関数によって極めて正確に表わすことができる．

$$U(R)=U_0(e^{-2(R-R_0)/a}-2e^{-(R-R_0)/a}) \tag{49.16}$$

(49.16) は **Morse ポテンシャル** *Morse potential*[1] を表わすもので，その曲線は第39図に示されている．Uは大きなRに対しては指数関数的に零に近づくが，$R=R_0$ では極小値 $-U_0$ をもち，また引力領域の“幅” a が平衡距離 R_0 よりも幾分小さければRが零に近づくとともに正の方に大きくなってゆく．

第39図の曲線は二原子分子に対して一般的に予想されるはずの形を示している．すなわちエネルギーの基準としては二つの中性原子が遠く離れたときにエネルギーが零になっているように任意に選んでおく；そうすれば，Rを減少させてゆくと，Uは最初 van der Waals の力のために負になってくる[2]．さらにRを小さくしてゆくと，この

1) P. M. Morse, *Phys. Rev.* **34**, 57 (1929).

2) Morse ポテンシャルの不正確な点の一つは元来 $1/R^6$ である van der Waals 項（§32.6 を見よ）を指数関数が置き換えている点である；しかしながらそのような大きなRでのUの振舞いは分子エネルギー準位には殆ど影響しないのである．

van der Waals の弱い引力はずっと強い Heitler-London の共鳴的な引力によって置き換えられる．さらに続けてRを減少させると，原子核（またはイオン殻）そのものが極く接近してくるために斥力が生じそのためUは増し始め正の方にいくらでも大きくなってゆくわけである[1]．

49-6 二原子分子の回転および振動

（49.15）は，（14.1）の場合と同様に，球座標を使って分離することができ，その結果は

$$w(R,\theta,\phi)=\frac{\chi(R)}{R}Y_{KM_K}(\theta,\phi)$$

となる．KおよびM_Kは中心力場内の単一粒子の場合の$\boldsymbol{l},\boldsymbol{m}$にそれぞれ類似した角運動量の量子数である．動径部分の方程式は次のようになる．

$$-\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2\chi}{dR^2}+W(R)\chi=E\chi$$
$$W(R)=U(R)+\frac{\hbar^2K(K+1)}{2MR^2},\qquad K=0,1,2,\cdots \tag{49.17}$$

（49.17）は質量Mの粒子のポテンシャル$W(R)$の下での一次元運動に対する波動方程式に他ならない．ただしその境界条件は$R=0$で$\chi=0$である．Kが余りに大きすぎるということがなければ，Wの一般的な形は第39図に示されたUの形に似ている．この場合に主に問題になるのは極小点の周りでの小振幅の振動である．その場合には，WをR_1での極小値W_0の付近で展開することができる．ただし，このR_1は$K=0$の場合にのみR_0と一致する．展開の結果は，高次の項を無視して

$$W(R)=W_0+\tfrac{1}{2}K_0(R-R_1)^2+b(R-R_1)^3+c(R-R_1)^4 \tag{40.18}$$

となる．ここでさらにbおよびcの項もまた無視し，かつRの区間を$-\infty$にまで延長すれば，（49.17）の固有個は付加項W_0をもった一次元調和動子の固有個になる．これは**回転量子数** *rotational quantum number* Kおよび**振動量子数** *vibrational quantum number* vの値の適当な範囲に対してはよい近似になっている．もう少し改良された近似は（49.18）のbおよびcの項を振動子に対する摂動とみなすことに得られる．b項からは二次の効果のみが生じるが（第VIII章の問題2を見よ），一方c項は一次の近似で

1） 本当の相互作用とは違って，Morse ポテンシャルは$R=0$で有限になっている．

あらわれ（その期待値は行列の方法で計算することができる），この両者のEに対する補正は同じオーダーの大きさになる．

49-7 エネルギー準位

bおよびcについてこのような最低次近似での（49.17）の固有値は

$$E=W_0+\hbar\left(\frac{K_0}{M}\right)^{\frac{1}{2}}\left(v+\frac{1}{2}\right)-\frac{\hbar^2b^2}{MK_0^2}\left[\frac{15}{4}\left(v+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{7}{16}\right]$$
$$+\frac{3\hbar^2c}{2MK_0}\left[\left(v+\frac{1}{2}\right)^2+\frac{1}{4}\right],\qquad v=0,1,2,\cdots \tag{49.19}$$

となる．W_0, K_0, b および c はすべて $K(K+1)$ の羃に展開できる．ただしその展開係数は関数 $U(R)$ のパラメーターを含んでくる．Uが（49.16）の形をもつ場合，各展開式として次のものが得られる．

$$\begin{aligned}
R_1&=R_0+\frac{\hbar^2K(K+1)a^2}{2MR_0^3U_0}\\
W_0&=-U_0+\frac{\hbar^2K(K+1)}{2MR_0^2}-\frac{\hbar^4K^2(K+1)^2a^2}{4M^2R_0^6U_0}\\
K_0&=\frac{2U_0}{a^2}-\frac{3\hbar^2K(K+1)}{MR_0^2a^2}\frac{a}{R_0}\left(1-\frac{a}{R_0}\right)\\
b&=-\frac{U_0}{a^3},\qquad c=\frac{7U_0}{12a^4}
\end{aligned}\tag{49.20}$$

ただし（49.20）は，$(v+\frac{1}{2})$ および $K(K+1)$ についての第二次近似の範囲で正しいEの値を与えるのに十分な項だけに止めてある．

（49.20）の第一式は分子が回転によって延びることを示している．第二式は平衡のエネルギー $-U_0$ と二次までの回転エネルギーとの和である．核を結びつける直線に垂直な軸の周りの分子の慣性能率を $I_0=MR_0^2$ とすれば，一次の回転エネルギーは $\hbar^2K(K+1)/2I_0$ となる；このエネルギーは剛体回転子に対するものと同一である（問題12を見よ）．第三式には延びによる力の常数の変化を示している．また第四，第五式からわかるように，非調和項 b および c による延びの補正はこの次数の近似では無視することができる．K_0 の展開式を使えば（49.19）の右辺の第二項は展開できて次のようになる．

$$\hbar\left(\frac{2U_0}{Ma^2}\right)^{\frac{1}{2}}\left(v+\frac{1}{2}\right)\left[1-\frac{3\hbar K(K+1)}{4MR_0^2U_0}\frac{a}{R_0}\left(1-\frac{a}{R_0}\right)\right]$$

同様に，(49.19) の最後の2項からは，定数因子が帳消しされて次の二次の振動エネルギーが得られる．

$$\left(-\frac{15}{16}+\frac{7}{16}\right)\frac{\hbar^2}{Ma^2}\left(v+\frac{1}{2}\right)^2=-\frac{\hbar^2}{2Ma^2}\left(v+\frac{1}{2}\right)^2 \tag{49.21}$$

これらの回転および振動のエネルギー準位がこの節の冒頭の略算値と大きさのオーダーでは一致していることは明らかである．v あるいはKのいずれかが増すと準位の間隔は単純な剛体回転子および調和振動子から予期されるものより小さくなってくる．

49-8　同一核の効果

二原子分子の二つの原子核が同一であるという場合では，核のスピンが零または整数ならば，波動関数は核の空間およびスピン座標の入れ換えに関して対称でなければならず，核スピンが半整数の場合には反対称でなければならない（§41 を見よ）．§14 の議論からわかるように，核波動関数のパリティは角部分 $Y_{KM_K}(\theta,\phi)$ によって決定され，K が偶数または奇数に応じて偶または奇のパリティをもつ．二つの原子核の空間座標を入れ換えるということは，それらの相対座標のベクトル $\mathbf{R}$ の符号を変えることと同等である．したがって，パリティは波動関数の空間対称性を決定することになる．これから次のことがわかる．すなわち零または整数スピンの核については，スピン関数は偶数のKに対しては対称，奇数のKに対しては反対称；半整数スピンの核については偶数のKに対してはスピン関数は反対称，奇数のKに対しては対称になる．

§41 の議論からわかるように，それぞれ $I\hbar$ のスピンをもつ二つの原子核からつくられる全部で $(2I+1)^2$ 個のスピン状態は $(I+1)(2I+1)$ 個の対称状態と $I(2I+1)$ 個の反対称状態に分けることができる．したがって，統計的平衡にある気体ではKが偶数の分子の数とKが奇数の分子の数との比は，I が零または整数の場合には $(I+1)/I$，I が半整数の場合には $I/(I+1)$ になるはずである[1]．このために，同一核の二原子分子の（回転準位による）帯スペクトルで線の強度が交替するという効果を生じる．適当な核のスピンおよび統計はともに，この方法によって決定することができ，かつその結果は §41 の一般的な結果と一致している．

1)　勿論この比は回転準位の間隔が熱エネルギー κT に比較して小さくない場合には Boltzmann 因子による修正をうける．

50□原　子　核

原子核の構造の研究に量子力学を応用しようとすると，最も簡単な場合を除いて殆どすべての場合に，数学的に非常に複雑な問題にまきこまれることになる．この節ではまず核のいくつかの一般的な性質にごく簡単に触れた上で，次に核の二体問題を考えることにする[1]．

50-1　原子核の一般的性質

原子核は陽子と中性子から構成されており，この両者は**核子** ***nucleon*** と総称されている．中間子のような核の内部で一時的なものとしてしか存在しない他の粒子は，構造論では考えに入れないのが普通である．陽子は水素原子の原子核で，中性子は陽子と対比すると荷電はもたないが，殆ど同一の質量をもち，スピンも同一，したがって同一の統計にしたがう粒子である（すなわちスピン $\frac{1}{2}\hbar$ で Fermi-Dirac の統計）．一つの原子核を規定する量としては荷電 Ze および質量Mがある．Zは一つの整数で e は陽子の正荷電である．M は O^{16}（質量数16の酸素の同位元素）の $\frac{1}{16}$ を単位にして測られるが，常にある整数Aに非常に近いことが知られている．このAは**質量数** ***mass number*** とよばれている．核内の中性子の数は $A-Z$ に等しい；したがって重陽子（重水素原子核）H^2 は1個の陽子と1個の中性子とから構成されており，アルファ粒子（ヘリウム原子核）は2個の陽子と2個の中性子から，金の原子核 Au^{197} は79個の陽子と118個の中性子から構成されていることになる．

相対性理論にしたがえば，ある核の中のZ個の陽子と $A-Z$ 個の中性子のそれぞ

---

1) 様々なレベルでのより立ち入った議論については，次のものを見よ．W. E. Meyerhof, "Elements of Nuclear Physics" (McGraw-Hill, New York, 1967)；M. A. Preston, "Physics of the Nucleus" (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1962)；R. D. Evans, "The Atomic Nucleus" (McGraw-Hill, New York, 1955)；A. E. S. Green, "Nuclear Physics" (McGraw-Hill, New York, 1955)；R. G. Sachs, "Nuclear Theory" (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1953)；G. Gamow and C. L. Critchfield, "Theory of Atomic Nucleus and Nuclear Energy Sources" (Oxford, New York, 1949)；J. M. Blatt and V. F. Weisskopf, "Theoretical Nuclear Physics" (Wiley, New York, 1952)；M. G. Mayer and J. H. D. Jensen, "Elementary Theory of Nuclear Shell Structure" (Wiley, New York, 1955)；A. de-Shalit and I. Talmi, "Nuclear Shell Theory" (Academic, New York, 1963)；E. J. Konopinski, "The Theory of Beta Radioactivity" (Oxford, London, 1966).

れの質量の和と，この核の質量Mとの差に光速度の2乗をかけたものは，個々の核子を一緒にしてその原子核をつくる際に発生するエネルギーに他ならない．このエネルギーは核の**結合エネルギー** ***binding energy*** とよばれており，便宜上百万電子ボルト（Mev）の単位で測られている．もう一つの十分よく定義されている（well-defined）量としては**核半径** ***nuclear radius R*** がある．この量は，いろいろな方法で測定することができる．高速度の中性子，陽子および電子等の散乱はその例である．元素の周期系列の大部分を通じて一核子当りの結合エネルギーおよび一核子当りの体積は略々一定であることが実験的に知られている．前者は約 8 MeV，後者を表わすには通常公式 $R=r_0A^{\frac{1}{3}}$ を使う．ただし $r_0\approx 1.2$ ないし 1.4×10^{-13} cm である．核子当りの結合エネルギーおよび体積が近似的に一定であるということは，**核力の飽和性** ***saturation property*** の一つの結果である．

50-2 二核子の相互作用

核に関連して解かれるべき最も基礎的な問題は一対の核子間の相互作用のエネルギーのパラメーターを決定することである．これらのパラメーターが分かってしまいさえすれば，重陽子より重い核の構造の問題は，量子力学の極度に複雑な応用問題の一つにすぎないことになるだろう．こうした情況は，主要な相互作用が Coulomb の法則によって与えられることがわかっている原子や分子の構造について得られているものと類似であるといってもよいだろう．しかし一方，二体の相互作用の知識だけでは，重い核の構造を決定するのに原理的にも十分ではないということも起こりうる．つまり，もしも3個，4個またはそれ以上の核子が極く接近したときにのみ現われ，したがって二核子系をしらべるだけではその存在もまた特性も推定できないはずの付加的な相互作用が存在するとすれば，確かにそのようなことが起こりうるわけである．多体の相互作用がある程度存在するかどうかという疑問は今なお片付いていない問題であるが，こゝではこれ以上その問題を論じないことにしよう．

この章の以下では議論を二核子系のみに限定することにし，かつその際の主要な相互作用は作用距離の短いものであると仮定する．この作用距離は重い核の半径に比べてかなり小さいものだと予想することは，十分理由があることであり，実際以下に述べるようなタイプの計算によればそれは 2×10^{-13} cm のオーダーであることが示される．

相互作用のポテンシャル・エネルギー $V(r)$ は2個の核子間の相対距離の大きさ r のみによって変化するとしその他の量を含む可能性は一応除外することにする．そうすれば，最初の問題はポテンシャル・エネルギー $V(r)$ の中での換算質量 μ の二粒子の相対運動に対する Schrödinger 方程式を解くことである．中性子と陽子とは殆ど同一の質量をもっているから，μ はそのどちらかの質量の半分に殆ど等しいものになる．

50-3　中性子-陽子の系

$V(r)$ の形に対する簡単な仮定としては次のような四角な井戸型のものがある（上巻96頁の第13図参照）：$r<a$ に対しては $V(r)=-V_0$，$r>a$ に対しては $V(r)=0$．§15 で示されたように，このポテンシャル内に質量 μ の粒子の束縛状態が存在するためには V_0a^2 は次の条件を満たしていなければならない．すなわち $V_0a^2>\pi^2\hbar^2/8\mu$，この最後の量は中性子-陽子系では 1.0×10^{-24}Mev-cm^2 に等しい．$a\approx2\times10^{-13}$ cm と仮定すれば，重陽子が存在するためには V_0 は 25Mev 以上でなければならない．重陽子は唯一つの束縛状態をもっているから，その状態が $l=0$ と対応するものと考えるのが妥当である．そうすれば，第Ⅳ章問題7の解から，束縛エネルギーの測定値 2.23Mev は $V_0\approx$ 36Mev として得られることがわかる．

この $V(r)$ を使えば非常に低エネルギーの中性子の陽子による散乱断面積も (19.28) 式から求めることができる．V_0 に比べて E を無視すれば $\sigma\approx3.6\times10^{-24}$ cm^2 となる．数電子ボルトのエネルギーの中性子の水素中での散乱断面積の測定値は約 20.4×10^{-24} cm^2 である；このエネルギーは V_0 に比べて十分無視できる程度には小さいが同時に水素分子内に陽子が束縛されていることが結果に影響しない程度には十分大きいものである．中性子-陽子相互作用がスピン状態に関係するということを使ってこの喰い違いを説明できることが，1935年に E. Wigner によって指摘された（未発表）．重陽子は $\hbar$ のスピンをもち，したがって三重項のスピン状態にあることがわかっている．しかし，電子と水素原子との交換衝突に関連して §43 にのべたのと同様な議論によれば，互いに衝突する陽子および中性子は，その衝突の4分の3では三重項状態にあり，衝突の4分の1では一重項状態にあるはずである．したがって一重項での断面積を 70×10^{-24} cm^2 ととればこの喰い違いは説明されることになる．

a は一重項相互作用に対してもやはり 2×10^{-13} cm に等しいとすれば，(19.28)

からこの断面積は 24 または 27Mev の深さのポテンシャルに対して得られることがわかる．明らかにこれは §19 で論じた共鳴散乱の場合で，これら二つのポテンシャルはそれぞれ仮想的な一重項状態と束縛された一重項状態に対応しているものである．どちらが正しいかという判定は散乱断面積の入射中性子エネルギーとの関係を基にしただけでは下すことができない；§19 で示したように，$l=0$ ならば，σ はいずれの場合にもエネルギーの単調減少関数となり，これら二つの関数の変化の仕方には十分な相違が見出せないからである．しかし，他の考察[1] からこの一重項状態は仮想的なものであることがわかっていて，その結果，上の作用距離に対応するポテンシャルの深さは 24Mev になる．

50-4 任意の形のポテンシャル

一対の核子間の相互作用のポテンシャルの特徴的な性格は短い作用距離 a と大きな深さ V_0 によって表わされる．ここで，a と V_0 は四角な井戸型の場合のみに用いられているのではなく，むしろ一般に $V(r)$ がその内部で確かに零と異なっていると認められる拡がりおよびその範囲での $V(r)$ の近似的な大きさのそれぞれを指すものとして用いられている．2～3 Mev までの適度のエネルギーの衝突では，E を重心座標系での運動エネルギー，かつ $k=(2\mu E)^{\frac{1}{2}}/\hbar$ とすれば，ka は 1 に比べて十分小さくなる．たとえば，$a=2\times10^{-13}$ cm とし，実験室系での入射粒子のエネルギーを 20Mev 程度として始めて，ka は 1 程度になる．したがって余り大きくないエネルギーに対しては，$l=0$ の部分波だけを考えておけばよい．また E および重陽子の結合エネルギー ϵ はいずれも V_0 に比べて十分小さい．このことから，$l=0$ の動径波動関数はポテンシャルの作用距離内ではエネルギーによっては僅かにしか変化せず，この距離の外では簡単な漸近形をもつことが結論される．このことはまた次のことを暗に示している．すなわち，このようなポテンシャルによって生じる束縛状態および低エネルギー散乱は本来，二つの量によってきまるはずのものなのである．その一つは V_0a^2 によって測られるポテンシャルの "強さ" で，もう一つは波動関数が漸近形をとり始める距離で，a がその大体の目安に

1) 判定材料として最も信頼しうるのは極めて低エネルギーの中性子のオルソおよびパラ水素中での散乱によるものである，このような判定の可能性は J. Schwinger and E. Teller, *Phys. Rev.* 52, 286 (1937) によって最初に指摘された．

なる.

要するに，任意の，短い作用距離でかつ主として引力できく強いポテンシャルは，実際上二つのパラメーターで代表させることができるということになる．このパラメーターとして強さと作用距離をとることができ，またそれらの関係として束縛状態のエネルギー $-\epsilon$ および E の適度の値に対する散乱波の位相のずれのエネルギーによる変化の仕方が指定されてくるわけである[1].

50-5 位相のずれに対する関係

議論を終始 $l=0$ の部分波に限ることにし，かつ $u(r)$ を r と動径波動関数との積とする．u の規格化は，その漸近形がポテンシャルの作用距離の外部で

$$u(r) \to \psi(r) \tag{50.1}$$

となるように選んでおく．ただし，すべての r に対して

$$\psi(r) \equiv \frac{\sin(kr+\delta)}{\sin\delta} \tag{50.2}$$

この位相のずれ δ は (19.8) 式で与えられた定義と一致しており，全断面積は (19.13) 式と同様に

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sin^2\delta \tag{50.3}$$

となる.

特定のエネルギー E_1 および E_2 に対する波動方程式は次のようになる.

$$\begin{aligned} &\frac{d^2u_1}{dr^2}+k_1{}^2u_1-Uu_1=0 \\ &\frac{d^2u_2}{dr^2}+k_2{}^2u_2-Uu_2=0 \end{aligned} \tag{50.4}$$

ただし，$U(r)=2\mu V(r)/\hbar^2$. (50.4) の第一式に u_2 をかけ，第二式に u_1 をかけ両者の差をとったものを r について $r=0$ から距離 R までにわたって積分する．ただし，R はポテンシャルの作用距離より幾分大きくとっておく.

$$\left(u_2\frac{du_1}{dr}-u_1\frac{du_2}{dr}\right)\Bigg|_0^R = (k_2{}^2-k_1{}^2)\int_0^R u_1u_2\,dr \tag{50.5}$$

---

1) かなり以前から想像されていたところではあったが，この結果は J. Schwinger の未発表の講義 (1947) において変分法を用いて始めて確かめられた．ここでの取扱いは H. A. Bethe, *Phys. Rev.* **76**, 38 (1949) による.

ψ は，U の項がない点を除けば u と同じ（50.4）の方程式を満たしている．したがって（50.5）式は ψ に対しても同様に成り立って，

$$\left(\psi_2\frac{d\psi_1}{dr}-\psi_1\frac{d\psi_2}{dr}\right)\Bigg|_0^R=(k_2{}^2-k_1{}^2)\int_0^R\psi_1\psi_2dr \tag{50.6}$$

となる．ここで（50.6）から（50.5）を差しひくと，上限 R での左辺からの寄与は $u(R)=\psi(R)$ によって帳消しになる．したがって $R\to\infty$ とすることができ，その結果，次式が得られる．

$$\left(\psi_1\frac{d\psi_2}{dr}-\psi_2\frac{d\psi_1}{dr}\right)_{r=0}-\left(u_1\frac{du_2}{dr}-u_2\frac{du_1}{dr}\right)_{r=0}$$
$$=(k_2{}^2-k_1{}^2)\int_0^\infty(\psi_1\psi_2-u_1u_2)dr \tag{50.7}$$

（50.2）から，この式の左辺の括弧のついた第一項は $k_2\cot\delta_2-k_1\cot\delta_1$ に等しくなる．また $u(0)=0$ であるから，左辺の第二項は零，結局（50.7）式は次のように書くことができる．

$$\begin{aligned}&k_2\cot\delta_2-k_1\cot\delta_1=\tfrac{1}{2}(k_2{}^2-k_1{}^2)\rho(E_1,E_2)\\&\rho(E_1,E_2)\equiv2\int_0^\infty(\psi_1\psi_2-u_1u_2)dr\end{aligned} \tag{50.8}$$

ここで E_1 を $-\epsilon$ で，$\psi_1(r)$ を $\psi_g(r)\equiv e^{-\beta r}$（ただし，$\beta^2=2\mu\epsilon/\hbar^2$）で，さらに $u_1(r)$ を（50.1）と似た形で規格化された基底状態の波動関数 $u_g(r)$ で置き換えると，（50.8）式の興味ある変形が得られる．その結果は

$$\begin{aligned}&k_2\cot\delta_2+\beta=\tfrac{1}{2}(k_2{}^2+\beta^2)\rho(-\epsilon,E_2)\\&\rho(-\epsilon,E_2)\equiv2\int_0^\infty(\psi_g\psi_2-u_gu_2)dr\end{aligned} \tag{50.9}$$

となる．もう一つの変形は E_1 を零にしてしまうことである：

$$\begin{aligned}&k_2\cot\delta_2+\frac{1}{a_t}=\frac{1}{2}k_2{}^2\rho(0,E_2)\\&\rho(0,E_2)\equiv2\int_0^\infty(\psi_0\psi_2-u_0u_2)dr\\&\psi_0\equiv1-\frac{r}{a_t},\quad\frac{1}{a_t}=-\lim_{E\to0}(k\cot\delta)\end{aligned} \tag{50.10}$$

ここで u_0 および ψ_0 についている添字は零エネルギーを意味する．a_t という量は（39.39）の次に定義された散乱の長さである．；（50.3）式から零エネルギーでの散乱

断面積は $4\pi a_t^2$ に等しいことがわかる．a_t についている添字の意味はそれが一重項ではなく三重項の相互作用に関するものであることを示すことにある．

50-6　有効領域

(50.8) から (50.10) までの各式は正確な式である．次に，ポテンシャルの一般的な形から示唆される，ρ に関する一つの近似を行なうことにする．(50.1) から ρ の被積分関数はポテンシャルの外部で零になっていることは明らかである．ポテンシャルの内部では，kr および βr が1に比べて小さい以上，ψ はすべて殆ど1に等しくなっている；また，一方 U は k^2 あるいは β^2 に比べて大きい以上，u は殆どお互いに相等しくなっている．したがって ρ のその引数による変化は極めて僅かであり，どこか都合のよいエネルギーに対して計算しておいてよいことになる．要するに，近似というのは上の方程式の中の ρ を次のもので置き換える点にある．

$$r_t \equiv \rho(0,0) = 2\int_0^\infty (\psi_0{}^2 - u_0{}^2)dr \tag{50.11}$$

これは §39 で導入された有効領域に他ならない；この場合もやはり，r_t の添字はそれが三重項の相互作用に関するものであることを示すものである．別の近似として，たとえば次のように有効領域を定義してもよい．たとえば，

$$\rho(-\epsilon, -\epsilon) = 2\int_0^\infty (\psi_g{}^2 - u_g{}^2)dr \tag{50.12}$$

問題17で示されているように，典型的な場合について (50.11) および (50.12) から計算された有効距離は互いに数パーセントの範囲内で一致している．

この近似によれば，散乱の位相のずれは次のように与えられる．(50.9) 式によれば（添字2を省略して）

$$k\cot\delta + \beta \approx \tfrac{1}{2} r_t (k^2 + \beta^2) \tag{50.13}$$

(50.10) によれば

$$k\cot\delta + \frac{1}{a_t} \approx \tfrac{1}{2} r_t k^2 \tag{50.14}$$

となる．β が κ と同一であることに注意し，(39.41) を利用すれば (50.13) と (50.14) は (39.40) と (39.39) に同じになる．(50.13) および (50.14) の方程式を比べてみれば，a_t, β および r_t の間に次の関係が得られる：

$$\frac{1}{a_t} \approx \beta - \tfrac{1}{2} r_t \beta^2 \tag{50.15}$$

これは（39.42）と同じものである.

β または a_t のどちらか一つをポテンシャルの強さのパラメーター，r_t を作用距離のパラメーターと考えてもよい．ただし，$1/\beta$ と a_t はかなり違ったもので，実際三つの量の中，任意の二つを指定すれば第三の量はきまるようになっている．いずれにせよ，このポテンシャルの形状によらない有効領域を使う理論によれば，ポテンシャルによるすべての結合エネルギーおよび低エネルギーでの散乱の諸性質はそれぞれのスピン状態に対する二つのパラメーターだけで決定されることになる．実験の結果は実際このようになっていることを示しており，その意味でこの理論の基礎になっている強い，作用距離の短い相互作用という仮定が確かめられているわけである.

実験値は三重項のスピン状態（$\epsilon = 2.225$Mev）に対しては $1/\beta = 4.32 \times 10^{-13}$ cm, $a_t = 5.40 \times 10^{-13}$ cm かつ $r_t = 1.72 \times 10^{-13}$ cm である；これらの値は（50.15）式に適合している．これに対応する四角な井戸型相互作用は 35.5Mev の深さと 2.03×10^{-13} cm の半径をもつものになる．一重項のスピン状態に対しては，$a_s =$ 23.7×10^{-13} cm となる．ここの負の符号は束縛状態が存在しないことを意味している；このときの有効領域は実験的には十分よく決定されていないが，おそらく 2.5×10^{-13} cm と 2.7×10^{-13} cm との間になるものと思われる[1]．深さが 16.8Mev で半径が 2.37×10^{-13} cm の四角な井戸型相互作用が上の a_s と $r_s = 2.47 \times 10^{-13}$ cm に対応すると；深さが 14.2Mev で半径が 2.57×10^{-13} cm のものは $r_s = 2.68 \times 10^{-13}$ cm に対応する[2].

50-7 交換の演算子

先にのべた中性子-陽子間の相互作用がスピンに関係するということは**スピン交換の演算子** *spin-exchange operator* $\frac{1}{2}(1 + \boldsymbol{\sigma}_N \cdot \boldsymbol{\sigma}_P)$ を使って表わすことができる．ただし，$\boldsymbol{\sigma}_N$ および $\boldsymbol{\sigma}_P$ はそれぞれ，（27.30）または（41.3）のようにして定義された中性子および陽子に対する Pauli のスピン行列である．問題18で示されているように，三重項のスピン関数はこの演算子の固有値 $+1$ をもつ固有関数になっており，一重項のスピン関数

1) H. P. Noyes, *Nucl. Phys.* **74**, 508 (1965).

2) 四角な井戸型相互作用のパラメーターは B. F. Gibson と A. Goldberg の好意によって提供されたものである.

は固有値 -1 をもつ固有関数になっている．(41.6) からわかるように，2 個のスピン $\frac{1}{2}$ 粒子の三重状態の関数はスピンの交換について対称であり，したがって交換演算子に対して固有値 $+1$ をもつわけである；同様に一重状態の関数は反対称であり，したがって交換演算子に対して固有値 -1 をもつのである．つまり上の演算子は実際に中性子と陽子のスピンを交換する効果を確かにもっている．

位置交換の演算子 *space-exchange operator*[1] は l が偶数の波動関数には $+1$ を，l が奇数の波動関数には -1 をかけることになる.；これまでに得られた結果はすべて $l=0$ に対するものであるから，その限りではこの演算子を導入しても効果はない．高エネルギー散乱に対しては，§19 の議論が示しているように，$l=1$ の部分波が問題になることがありうる．もしも $l=1$ に対する位相のずれ δ_1 の大きさが小さく，さらに高次の位相のずれを無視することができれば，(19.32) 式は次のように近似することができる．

$$\sigma(\theta)\approx\frac{1}{k^2}(\sin^2\delta_0+3\delta_1\sin 2\delta_0\cos\theta)$$

δ_1 が問題になってくる程度に十分高いエネルギーに対しては，$l=0$ の位相のずれ δ_0 は大体 0° と 90° の間にくることになり，その結果，角度の非対称性の符号は δ_1 の符号によって決定されることになる．

ところで，もしも相互作用が大部分，位置を交換しない型のものであったとすれば，ポテンシャルは $l=1$ に対して負（すなわち引力）になり，δ_1 は正になるはずである．この場合は陽子に対して入射してくる中性子は，重心系および実験室のいずれにおいても圧倒的に前方に散乱されることになる．一方，もしも座標交換の演算子が相互作用を支配していたとすれば，ポテンシャルは $l=1$ に対して斥力で，δ_1 は負になるはずである．この場合，中性子は重心系では後方に，実験室系では直角方向に圧倒的に散乱されることになり，陽子はいずれの系においても前方に反跳される傾向をもつはずである．この効果はある一つのものの中性子と陽子という二つの状態間での入れ替りを伴ったある位置非交換型の散乱として物理的に解釈することができる．

余り大きくないエネルギーでの散乱実験によれば，散乱の微分断面積は重心系で 90° の周りに殆ど対称になっていることが示されている．もしもこれが厳密に対称なも

---

1) この演算子は W. Heisenberg, *Z. Physik* **77**, 1 (1932) の最初の示唆に基づき，それを修正して E. Majorana, *Z. Physik* **82**, 137 (1933) により始めて導入された．

のとすれば，最も簡単でかつ最もそれらしい事情としては，l が偶数のすべての位相のずれが零あるいは l が奇数のすべての位相のずれが零の二つの中のいずれかが起こっていることが考えられる．$\delta_0 \neq 0$ であることが知られている以上，最初の場合は不可能である．このようにして余り大きくなくエネルギーでの中性子-陽子相互作用のスピン交換性に対する一つの大ざっぱな近似としての **Serber の相互作用** *Serber interaction* に導かれる：この相互作用では，中性子-陽子相互作用のスピン交換部分とスピン非交換部分の係数は相等しくかつ同符号になっておりその結果，l が奇数の状態では相互作用が存在しないのである．

50-8　陽子-陽子散乱

速い陽子の水素中での散乱は，二つの衝突粒子の同一性とスピンとを適当に考慮した修正を行なっておけば（§41 を見よ），§21 に大筋を説明した方法によって取扱うことができる．相互作用が純粋のクーロン場であるときには，(21.10) と (41.2) を組合わして次の **Mott の散乱公式** *Mott scattering formula*[1] が得られる．

$$\sigma(\theta)=\left(\frac{e^2}{2\mu v^2}\right)^2\left\{\operatorname{cosec}^4 \tfrac{1}{2}\theta+\sec^4 \tfrac{1}{2}\theta - \operatorname{cosec}^2 \tfrac{1}{2}\theta \sec^2 \tfrac{1}{2}\theta \cos\left[\frac{e^2}{\hbar v}\ln\left(\tan^2 \tfrac{1}{2}\theta\right)\right]\right\} \qquad (50.16)$$

ただし，これは重心系で表わされている．この公式は入射エネルギーが約 0.2Mev 以下の陽子についての実験に限って，使うことができる．というのは，高エネルギーに対しては陽子は十分近くにまで接近して，その結果本来の核相互作用が無視できなくなるからである．数 Mev のエネルギーまでのところでは，(21.27) の δ_0 の項だけを考えに入れておけばよい．ただし，排他原理によって $l=0$ の部分波には一重項のスピン状態が伴って現われることを思い出しておく必要がある．つまり三重項状態での陽子-陽子間の相互作用についての知識を得たいと思えば，高速陽子についての実験が必要になるわけである．有効領域の理論は一重項の陽子-陽子相互作用に対してもつくることができて，一重項の中性子-陽子相互作用に対するのと大体同一のパラメーターが導かれている[2]．

1)　N. F. Mott, *Proc. Roy. Soc.* (*London*) **A126**, 259 (1930). μ は陽子質量の半分，v は相対速度の大きさである．

問　　題

1. Thomas-Fermi モデルでの電子密度 $n(r)$ に対する表式をディメンジョンのない関数 χ を使って求め，さらに，全電子の一定の割合を含む球の半径が $Z^{-\frac{1}{3}}$ に比例することを示せ．

2. Lagrange の未定乗数の方法を使って，u が規格化されたままで変化させたときの積分 (47.9) が停留値をとる条件は (47.11) で与えられることを示せ．

3. 二個の p 電子 $(l=1)$ は Russell-Saunders 結合の場合は $L=0,1,2$ および $S=0,1$ をとりうる．二個の電子の n の値が異なる場合，L および S のこれらの値のすべての組合せが許されるか？，また，n の値が同じであるとき，これらはすべて許されるか？

4. Russell-Saunders 結合の場合のスピン波動関数は，全スピン量子数 S の値が異なった $\mathbf{S}^2$ の固有関数になっていれば互いに直交することを示せ．この際 § 10 で異なった固有値に対応するエネルギー固有関数が直交することを示すのに使われたものと似た方法を使え．

5. 直接計算によって，$\mathbf{J}=\mathbf{L}+\mathbf{S}$ は $\mathbf{L}\cdot\mathbf{S}$ と，したがってまた (48.1) のハミルトニアンと可換であることを示せ．

6. 10^5 gauss の磁場内にある水素原子の場合について，(48.9) の $\mathbf{H}$ について一次の項と運動エネルギーの項との比を算出せよ．

7. (48.12) に類似だが $j=l\pm\frac{1}{2}$ の場合に適用可能な 1 電子状態に対する Land の g 因子は

$$g=\frac{2l+1\pm1}{2l+1}$$

となることを証明せよ．(28.13) の Clebsch-Gordan 係数を $j_1=l, j_2=\frac{1}{2}$ の場合に拡張したものを利用すること．

8. (48.11) の二つの摂動項がアルカリ原子に対して等しくなる磁場の強さを算出せよ．

9. 磁場が弱い場合，アルカリ原子での $^2P\rightarrow{}^2S$ 遷移の π および σ Zeeman 成分の相対的なずれおよび強度を示すダイアグラムをつくれ，磁場が強い場合にも同様なダイアグラムをつくれ．

10. 電子運動の一周期の間に，分子の原子核が通過する距離の，分子の大きさに対する比は，振動運動の場合には約 $(m/M)^{\frac{3}{4}}$ のオーダーで，回転運動の場合には (m/M) のオーダーであることを示せ．これらの結果は，断熱型の近似の正しさを示しているか？

11. 水素分子に対して得られた核間ポテンシャル (49.14) は大きな R に対して § 32 で得られた $-1/R^6$ の形に近づいてゆくか？，もしそうでないとすれば，その理由は？

12. 剛体回転子に対する波動方程式をつくり，それを解け．；ただし，この剛体回転子はある特定の軸のまわりの回転の運動エネルギーをもたず，かつ二つの直交する軸のまわりの慣性能率は等しいものとする．

13. 二原子分子の回転準位間の遷移に対する選択則を導け．

14. 二原子分子の二つの原子核が同一の場合および相異なる場合について，その振動遷移の選択則を調べよ．

15. (49.18) の展開で無視した第五次および第六次の項の二原子分子の振動エネルギーへの寄与を

---

2) 広範囲のエネルギー領域に対する核子—核子相互作用の綜合報告としては A. E. S. Green, M. H. MacGregor and R. Wilson, *Rev. Mod. Phos.* **39**, 498 (1967) およびこの雑誌の同一号にある他の諸論文がある．

求め，(49.21) で与えられている $(v+\frac{1}{2})^2$ のエネルギーを導いた際にそれらの項を無視したことが正当化されることを示せ．調和振動子に対する x^5 および x^6 の行列要素を求めるのに行列法を用いよ．

16. 中性子と陽子との相互作用は，それらが一重項状態にあるときにも三重項状態にあるときも等しく井戸型で表わされるものと仮定すると，重水素の束縛エネルギー $(l=0)$ と遅い中性子の散乱断面積の両方に適合するような a の値は存在するか？ もし存在するなら，それはどれくらいか．

17. 重水素の束縛エネルギーの値を用いて，三重状態における井戸型ポテンシャルの有効領域を (50.11) 式および (50.12) 式より算出してそれらを比較せよ．ただし $a=2\times10^{-13}$ cm と仮定せよ．

18. スピン交換の演算子 $\frac{1}{2}(1+\boldsymbol{\sigma}_N\cdot\boldsymbol{\sigma}_P)$ が本文でのべた性質をもつことを示せ．ついで，(23.38) 式を利用して一重項および三重項状態の射影演算子をつくれ．最後に三重項のポテンシャルエネルギーを $V_t(r)$，一重項のそれを $V_s(r)$ として，中性子-陽子相互作用を記述する，スピンを含んだ単一のポテンシャルエネルギーをつくれ．

19. §21 の議論を用いて，位相のずれが δ_0 (それ以外は零) をもつ陽子-陽子散乱と (50.16) で与えられる Mott 散乱との比の表式を求めよ．

第XIII章　相対論的波動方程式

この章では非相対論的 Schrödinger 波動方程式を拡張して光速度に近い速度をもつ粒子の運動を記述するような形に拡張することを試みる．このような拡張は，それぞれが特殊相対性理論[1] の Lorentz 変換公式に適合している多数のやり方で可能なわけであるが，その結果得られる相対論的波動方程式に共通する一つの著しい特徴は粒子のスピンというものが，最初から理論の中に組み込まれていて，Pauli が Schrödinger の非相対論的方程式に対して，電子のスピンを付け加えたようなふうに，粒子のスピンを後から持ち込むことができないようになっているということである．したがってこの点を考慮すれば，ある特定の種類の粒子に対してどういう形の方程式を適用すべきかということに対する有用な基準が得られるわけである．ここではこれらの相対論的波動方程式のうち，二つだけを取り上げることにする．すなわち Schrödinger が提唱しその後 π 中間子を記述することが明らかにされたスピン 0 の方程式と電子を記述するために Dirac の提唱したスピン $\frac{1}{2}$ の方程式とである．これらの方程式を論ずるに当っては，種々の結果を導き出すことに重点を置くことにして，この種の手続きの Lorentz 不変性をはっきりさせることはしない．したがって，記号も従来のごとく三次元的なベクトル記号を使用して，特殊相対論のエレガントな四次元的記法の導入は避けることにする．また方程式の Lorentz 不変性は特に証明するまでもなく，空間座標と時間座標との間の対称性を考慮すれば十分推量されるところである．

51□Schrödinger の相対論的方程式

Schrödinger が彼の非相対論的波動方程式を展開した当時，同時に特殊相対論の要請に

---

1)　特殊相対性理論の大要としては，たとえば次のものを参照されたい；H. M. Schwartz, "Introduction to Special Relativity" (McGraw-Hill, New York, 1968) の第3, 4, 8章；P. G. Bergmann, "Introduction to the Theory of Relativity," (Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J., 1946)［邦訳前出］の第1部；C. Møller, "The Theory of Relativity" (Oxford, London, 1952)［邦訳：伊藤訳「相対性理論」みすず書房］の第I～III章．

合致するようにそれを拡張する方法を提案した[1]. すなわち古典力学においては自由粒子のエネルギーと運動量との間に成立する非相対論的関係

$$E=\frac{\mathbf{p}^2}{2m} \tag{51.1}$$

が，相対論的な場合には，静止質量エネルギー mc^2 を含めて

$$E^2=c^2\mathbf{p}^2+m^2c^4 \tag{51.2}$$

という関係に移されることを考えれば，この種の方程式はごく自然に導くことができる. つまり，ここでEと$\mathbf{p}$とに対して (6.13) の置き換え

$$E\to i\hbar\frac{\partial}{\partial t}, \qquad \mathbf{p}\to -i\hbar\nabla \tag{51.3}$$

を施してやることにするわけである.

51-1 自由粒子

自由粒子に対する相対論的波動方程式は，(51.3) を (51.1) に代入し (6.11) を導いたのと全く同様に，(51.3) を (51.2) に代入して波動関数 $\psi(\mathbf{r},t)$ に作用させれば得られる. その結果は

$$-\hbar^2\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=-\hbar^2c^2\nabla^2\psi+m^2c^4\psi \tag{51.4}$$

となるが，これは

$$\exp i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t) \tag{51.5}$$

という形の平面波の解をもっている. この解は (51.3) の演算子 $E,\mathbf{p}$ の固有関数であって，その固有値はそれぞれ $\hbar\omega, \hbar\mathbf{k}$ である. そしてまた容易にわかるように

$$\hbar\omega=\pm(\hbar^2c^2\mathbf{k}^2+m^2c^4)^{\frac{1}{2}} \tag{51.6}$$

であるときに (51.5) は (51.4) をみたしている. 根号に正負の符号がつくのは (51.2) という古典論の式から導かれるエネルギーの符号が不定であることに対応しているわけである. さし当りここでは正の平方根だけをとることにし，§53 の終りで負のエネルギーをもつ解にたちもどることにしよう.

荷電および電流密度を表わす表式は §7 におけると同様にして求めることができる. まず保存方程式

---

1) E. Schröidnger, *Ann. Physik* **81**, 109 (1926) 第6節.

$$\frac{\partial}{\partial t}P(\mathbf{r},t)+\nabla\cdot\mathbf{S}(\mathbf{r},t)=0 \tag{51.7}$$

は Lorentz 変換に関して不変になっている．さて，この式を導くには (51.4) に左から ψ^* を掛け，その複素共軛な方程式に左から ψ をかけてその差をとり，次のような実の量を定義すればよい：

$$\begin{aligned} P(\mathbf{r},t)&=\frac{i\hbar}{2mc^2}\left(\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}-\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right) \\ \mathbf{S}(\mathbf{r},t)&=\frac{\hbar}{2im}(\psi^*\nabla\psi-\psi\nabla\psi^*) \end{aligned} \tag{51.8}$$

ここで $\mathbf{S}$ に対する表式は非相対論な形 (7.3) と同一であり，また P に対する表式も非相対論的な極限をとると (7.1) に帰着することを示すことができる (問題1参照)．ここで注意せねばならないのは (51.8) の P が必ずしも正であるとは限らず，そのため位置の確率密度として解釈できないことである．しかし荷電密度はそれが実の量でありさえすれば符号がどちらであってもさしつかえないから，P に e をかけたものは荷電密度と解釈することができる．

51-2 電磁ポテンシャル

電磁ポテンシャル $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$，$\phi(\mathbf{r},t)$ が存在する場合，これを波動方程式の中にとり入れるためには ϕ と $(1/c)\mathbf{A}$ とが，E および $\mathbf{p}$ と同一の Lorentz 変換性をもっていることを利用してやればよい．非相対論的な (24.29) 式の形から類推して，電荷 e の粒子に対しては (51.2) を

$$(E-e\phi)^2=(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2+m^2c^4 \tag{51.9}$$

で置き換える．さらに (51.3) の置き換えをすると

$$\begin{aligned} &\left(-\hbar^2\frac{\partial^2}{\partial t^2}-2ie\hbar\phi\frac{\partial}{\partial t}-ie\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}+e^2\phi^2\right)\psi \\ &\quad=[-\hbar^2c^2\nabla^2+2ie\hbar c\mathbf{A}\cdot\nabla+ie\hbar c(\nabla\cdot\mathbf{A})+e^2\mathbf{A}^2+m^2c^4]\psi \end{aligned} \tag{51.10}$$

さて，方程式 (51.10) と非相対論的な極限でこれに対応する (24.39) 式との間の関連を次のようにして示すことができる．まず (51.10) において

$$\psi(\mathbf{r},t)=\psi'(\mathbf{r},t)e^{-imc^2t/\hbar} \tag{51.11}$$

という置き換えを施した上で，さらに ψ' に $i\hbar(\partial/\partial t)$ を作用させた結果は $e\phi\psi'$ と同程度の大きさであって，これは $mc^2\psi'$ に比べて小さいと仮定する．これは静止エネル

ギーを引き去って，その残りのエネルギーがこれに比べて十分に小さいと仮定するのと同等である．(51.11) を微分すると

$$\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(\frac{\partial\psi'}{\partial t}-\frac{imc^2}{\hbar}\psi'\right)e^{-imc^2t/\hbar}$$

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2}=\left(\frac{\partial^2\psi'}{\partial t^2}-\frac{2imc^2}{\hbar}\frac{\partial\psi'}{\partial t}-\frac{m^2c^4}{\hbar^2}\psi'\right)e^{-imc^2t/\hbar}$$

これら二つの微係数のそれぞれの第一項は (51.10) の左辺の最後の二つの項と同様，いずれも無視することができるから，その結果 (51.10) の左辺は

$$\left(2i\hbar mc^2\frac{\partial\psi'}{\partial t}+m^2c^4\psi'-2emc^2\phi\psi'\right)e^{-imc^2t/\hbar}$$

となる．こういう近似を行なった上で ψ' を ψ と書き換えると，(51.10) は (24.39) と同じになる．

方程式 (51.10) に Pauli のスピン・マトリックス (41.3) をとり入れようとすれば，理論の不変性を壊す以外に手はない．しかしスピン行列は四次元ベクトルのように変換せず三次元ベクトルのように変換し，さらに ψ はスピン関数 (33.4) のように二成分でなく一成分だけしかもたないのであるから，この結果は別に驚くにはあたらない．結局，Schrödinger の相対論的方程式はスピンを持たない粒子を表わしているものと考えられる．

(24.39) に $V\psi$ という項をつけ加えれば方程式 (44.1) が得られたのであるが，(51.9) 式の構造からわかるように，(51.10) にはこのような"位置エネルギー"の項を好き勝手に付け加えることはできない．つまり，まず最初にこういう項の Lorentz 変換に対する変換性を調べておかねばならないわけである．もしそれが四次元ベクトルの一部のような変換を受けるのなら，丁度 ϕ と $(1/c)\mathbf{A}$ が (51.9) に組み込まれたような具合に，ベクトルの残りの部分をも含ませておかねばならない．もしそれが Lorentz 変換に関して不変であるなら，静止エネルギーの一部として含ませることができる．

51-3 方程式の変数分離

ポテンシャル $\mathbf{A}, \phi$ が時間に関係しない場合には，波動方程式 (51.10) は $\mathbf{r}$ と t とに関して分離することができる．すなわち，そのときには

$$\psi(\mathbf{r},t)=u(\mathbf{r})e^{-iEt/\hbar}$$

とおいて (51.10) に代入すると

$$(E-e\phi)^2u=[-\hbar^2c^2\nabla^2+2ie\hbar c\mathbf{A}\cdot\nabla+ie\hbar c(\nabla\cdot\mathbf{A})+e^2\mathbf{A}^2+m^2c^4]u \qquad (51.12)$$

今 $\mathbf{A}=0$, でかつ $\phi(\mathbf{r})$ が球対称という特別な場合を取ると, (51.12) 式は

$$(-\hbar^2c^2\nabla^2+m^2c^4)u(\mathbf{r})=[E-e\phi(r)]^2u(\mathbf{r}) \qquad (51.13)$$

となる. これは球座標を使って変数分離が可能であって (§14 を見よ),

$$u(r,\theta,\phi)=R(r)Y_{lm}(\theta,\phi)$$

$$\left[-\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{d}{dr}\right)+\frac{l(l+1)}{r^2}\right]R=\frac{(E-e\phi)^2-m^2c^4}{\hbar^2c^2}R,\qquad l=0,1,2\cdots \qquad (51.14)$$

となる. ここで $E=mc^2+E'$ とおき, さらに E' と $e\phi$ とは mc^2 に比べて無視できるものと仮定すると, この式は動径 r に対する非相対論的な方程式に帰着する. そのとき (51.14) 式の右辺の分数の部分は当然期待されるように $(2m/\hbar^2)(E'-e\phi)$ になる.

51-4 Coulomb 場でのエネルギー準位

$e\phi=-Ze^2/r$ としたときの (51.14) の正確な解は §16 の結果を使って容易に求められる. (51.10) で表わされる粒子はスピンを持たないから, 勿論電子ではあり得ないが, このことを度外視すればこの情況は水素原子をあらわしていると考えてよい.

$\rho=\alpha r$ とおくと, (51.14) は次のようになる:

$$\frac{1}{\rho^2}\frac{d}{d\rho}\left(\rho^2\frac{dR}{d\rho}\right)+\left[\frac{\lambda}{\rho}-\frac{1}{4}-\frac{l(l+1)-\gamma^2}{\rho^2}\right]R=0$$

$$\gamma\equiv\frac{Ze^2}{\hbar c},\qquad \alpha^2\equiv\frac{4(m^2c^4-E^2)}{\hbar^2c^2},\qquad \lambda\equiv\frac{2E\gamma}{\hbar c\alpha} \qquad (51.15)$$

$l(l+1)$ が $l(l+1)-\gamma^2$ で置き換えられている点以外は, これはまさしく (16.7) 式と一致している. パラメーター λ は $\rho=\infty$ での R の境界条件で決まり, (51.15) の最後の二式から α を消去すると, E は λ によって次のように表わされる.

$$E=mc^2\left(1+\frac{\gamma^2}{\lambda^2}\right)^{-\frac{1}{2}} \qquad (51.16)$$

(16.7) の解き方を調べればわかることだが, $\rho=0$ と $\rho=\infty$ とで有限な (51.15) の解が存在するのは

$$\lambda=n'+s+1 \tag{51.17}$$

のときに限られる．ただし，n' は0か正の整数で，s は二次方程式

$$s(s+1)=l(l+1)-\gamma^2 \tag{51.18}$$

の解のうち負でないものである．この方程式は二つの解

$$s=-\tfrac{1}{2}\pm\tfrac{1}{2}[(2l+1)^2-4\gamma^2]^{\frac{1}{2}} \tag{51.19}$$

をもち，$l>0$ に対してそのうち一つは正，他方は負である．

$l=0$ のとき，上の s の価は共に負になり，その結果 $r=0$ の近傍で r^s のように振舞う $R(r)$ は，原点で特異性を示すことになる．；しかし一方，γ は非常に小さいので（e を電子の電荷とするとほぼ $Z/137$）(51.19) において上位の + の符号をとっておけば，物理的に問題になるような Z の価に対して零に近いような s の価が得られるが，他方下の − の符号をとれば s は -1 に近い値をとることになる．このような s の二様の値のどちらを選ぶかは，次のような考え方できめることができる．物理的に実現しうる場合では，クーロン場の源は，ある種の小さくはあるが有限の大きさ a をもっている．この a はたとえば今の場合には核半径に対応するものであって，したがって $\phi(r)$ はいたるところで有限になっている．ところで，$r=0$ で有限な解 $R(r)$ は，$a\to 0$ の場合 (51.19) の上位の符号に対応する点源によるクーロン解に近づくことを証明することができる（問題3を見よ）．そこで l のすべての価に対して (51.19) の + の符号をとると，(51.17) から

$$\lambda=n'+\tfrac{1}{2}+[(l+\tfrac{1}{2})^2-\gamma^2]^{\frac{1}{2}} \tag{51.20}$$

となる．

(51.16) と (51.20) とは (16.15) の非相対論的エネルギー準位に対する微細構造を与える．これを調べるには，エネルギー準位を表わす式を γ^2 のベキで展開すればよい．この結果を γ^4 までとった結果は次のようになる．

$$E=mc^2\left[1-\frac{\gamma^2}{2n^2}-\frac{\gamma^4}{2n^4}\left(\frac{n}{l+\frac{1}{2}}-\frac{3}{4}\right)\right] \tag{51.21}$$

ここで，$n=n'+l+1$ は (16.14) 式の全量子数で，正の整数値をとることができる．(51.21) の右辺第一項は静止エネルギーである．第二項は

$$-\frac{mc^2\gamma^2}{2n^2}=\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}$$

で (16.15) と一致する．第三項は微細構造のエネルギーで，n が同じで l の異なる状

態の間にあった縮退が除かれている．ある与えられたnに対する微細構造の準位全体が拡がっている幅は（51.21）から簡単に

$$\frac{mc^2\gamma^2}{n^3}\frac{n-1}{n-\frac{1}{2}} \tag{51.22}$$

であることがわかる．この値は水素のスペクトルで実験的に観測されるものよりずっと大きい．

52□Diracの相対論的方程式

相対論的波動方程式を見つけるという問題に対して Dirac[1] は，（24.1）のハミルトニアン形式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t)=H\psi(\mathbf{r},t) \tag{52.1}$$

を出発点に選んだ．自由粒子に対する古典論での相対論的なハミルトニアンは（51.2）式の右辺の平方根のうち，正の符号をもつものである．しかしこれを（52.1）に代入し$\mathbf{p}$を $-i\hbar\nabla$ で置き換えて得られる波動方程式は空間微係数と時間微係数に関して対称でなく，したがって，相対論的ではない．そこで Dirac はこのハミルトニアンを修正して，それが空間微係数について線型になるようにしたのである．

52-1 自由粒子の方程式

運動量と質量の項とに関して線型であるようなハミルトニアンのうち最も簡単なものは

$$H=-c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}+\beta mc^2 \tag{52.2}$$

である．これを（52.1）に代入すると，

$$(E-c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}-\beta mc^2)\psi=0$$

あるいは (52.3)

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}+i\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla-\beta mc^2\right)\psi=0$$

---

1) P. A. M. Dirac, *Proc. Roy. Soc.* **A117**, 610 (1928)；"The Principles of Quantum Mechanics", 第4版 (Oxford, New York, 1958). の第XI章［邦訳，朝永他訳「量子力学」(岩波書店) 1968］．また J. D. Bjorken and S. D. Drell, "Relativistic Quantum Mechanics" (McGraw-Hill, New York, 1964)；H. A. Bethe and E. E. Salpeter, "Quantum Mechanics of One-and Two-electron Atoms," chap. I(*b*) (Springer, Berlin, 1957) も見よ．

という波動方程式が導かれる．ここで四つの量 $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$ および β について考えてみよう．もし（52.3）が自由粒子を表わすものとすれば，ハミルトニアンの中に空間座標や時間を含む項があってはならない．というのは，こういう項は空間-時間に依存するエネルギーという性質をもち，これに対応して粒子に働く力が生じることになるからである．また空間微係数や時間微係数は $\mathbf{p}$ および E のみを介して表われるべきであって，$\boldsymbol{\alpha}$ や β の中に表われてはならない．それは（52.3）がこれら微係数のすべてに関して線型であるべきであるからである．したがって $\boldsymbol{\alpha}$ と β とは，$\mathbf{r}, t, \mathbf{p}$ および E とは独立であって，これらすべてと交換可能であることが結論される．これは必ずしも $\boldsymbol{\alpha}$ と β とが単なる数であることを意味しない．なぜなら，$\boldsymbol{\alpha}$ や β は互いに交換可能でなくてもよいからである．

ここで，$\boldsymbol{\alpha}, \beta$ についてさらに深く調べることができるように，（52.3）の任意の解はまた Schrödinger の相対論的方程式（51.4）の解になっているということを要求することにする（その逆は成立しなくともよい）．こういう要請が合理的であるというのは，外場の無い場合には，方程式（52.3）の解で波束に対応するようなものは，古典論的な粒子の運動に似た運動を表わしていて，エネルギー，運動量および質量の間に成立する古典論的な関係式（51.2）をみたしていなければならないからである．それで（51.3）式に左から（$E+c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}+\beta mc^2$）をかけると，次の式が得られる：

$$\begin{aligned}\{E^2-c^2[&\alpha_x{}^2p_x{}^2+\alpha_y{}^2p_y{}^2+\alpha_z{}^2p_z{}^2+(\alpha_x\alpha_y+\alpha_y\alpha_x)p_xp_y\\&+(\alpha_y\alpha_z+\alpha_z\alpha_y)p_yp_z+(\alpha_z\alpha_x+\alpha_x\alpha_z)p_zp_x]-m^2c^4\beta^2\\&-mc^3[(\alpha_x\beta+\beta\alpha_x)p_x+(\alpha_y\beta+\beta\alpha_y)p_y+(\alpha_z\beta+\beta\alpha_z)p_z]\}\psi=0\end{aligned}\qquad(52.4)$$

勿論，ここで E や $\mathbf{p}$ は（51.3）の微分演算子で置き換えられるものとする．したがって，もし $\boldsymbol{\alpha}, \beta$ が次の関係をみたすときには（52.4）は（51.4）に一致する：

$$\begin{aligned}&\alpha_x{}^2=\alpha_y{}^2=\alpha_z{}^2=\beta^2=1\\&\alpha_x\alpha_y+\alpha_y\alpha_x=\alpha_y\alpha_z+\alpha_z\alpha_y=\alpha_z\alpha_x+\alpha_x\alpha_z=0\\&\alpha_x\beta+\beta\alpha_x=\alpha_y\beta+\beta\alpha_y=\alpha_z\beta+\beta\alpha_z=0\end{aligned}\qquad(52.5)$$

このような関係を有する四つの量はそれぞれの一対については互に**反可換** ***anticommute*** であるといわれており，かつこれらの2乗は1になっている．

$\boldsymbol{\alpha}, \beta$ は互いに交換可能ではなく反可換であるから，単なる数ではあり得ない．第VI章で述べたように，このようなタイプの量は行列で表わすことができる．そしてこ

れらの行列表示を構成しておくと計算に便利である．まず（52.2）のHはエルミチアンであるから，$\boldsymbol{\alpha}, \beta$ という四つの行列はそれぞれエルミチアンでなければならず，したがってまた正方行列でなければならない．問題は，これらの行列のある一つが対角線行列になっているような具体的な表示（$\boldsymbol{\alpha}, \beta$ は交換可能ではないから，残りは対角線行列ではあり得ない）を実際に見つけることである．話を簡単にするために，できるだけ次数(rank）の低い表示を求めることにする．

52-2 αおよびβに対する行列

これら四つの行列の２乗は，すべて単位行列になるのだから，その固有値は +1 と −1 とである．さしあたり β を対角線行列に指定して，その行と列を並べかえ，+1 の固有値をすべて次数 n の行列にまとめ，−1 の固有値をすべて次数mの行列にまとめることにしよう．β は $\boldsymbol{\alpha}$ と反可換であるから単位行列の常数倍であり得ない．したがって，n とmとはいずれも０より大きい．β の行列を図式的に表わすと

$$\beta=\begin{bmatrix}\mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1}\end{bmatrix} \tag{52.6}$$

であるが，これは

$$\left[\begin{array}{cccc|cccc} 1 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & 1 & \cdot & \cdot & 0 & 0 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \hline 0 & 0 & \cdot & \cdot & -1 & 0 & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & \cdot & 0 & -1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{array}\right] \tag{52.7}$$

を略記したものである．(52.7）の点線は（52.6）の中に出てくる部分行列 **1**，**0**，**0** および −**1** を分離するものである[1]．今マトリックス方程式 $\alpha_x\beta+\beta\alpha_x=0$ を考えると，その jl 要素は

$$(\alpha_x)_{jl}(\beta_j+\beta_l)=0$$

と表わされる．ここで β_j と β_l とは，(52.6）や（52.7）のように並べられた β の固有値のうちの二つである．もし $\beta_j=\beta_l$ であれば $(\alpha_x)_{jl}=0$ であり，また β_j と β_l と

1) ここの行列 **1**，**0** は §21 で定義した単位行列および零行列 1，○ と同一である．

の符号が異なれば $(\alpha_x)_{jl}$ は0でなくてもよい．したがって，α_x に対する行列は次のような形に書くことができる．

$$\alpha_x=\begin{bmatrix}0 & \alpha_{x1}\\ \alpha_{x2} & 0\end{bmatrix} \tag{52.8}$$

ここで α_{x1} は n 行 m 列，α_{x2} は m 行 n 列の行列である．また (52.8) の2乗は単位行列であるから

$$\alpha_{x1}\alpha_{x2}=1, \qquad \alpha_{x2}\alpha_{x1}=1 \tag{52.9}$$

が得られる．このうち初めの式の右辺における単位マトリックスは n 行 n 列，第2の式における単位行列は m 行 m 列である．n と m とが1と2，あるいは2と1である場合には (52.9) をみたすような行列が存在しないことは比較的容易に示される．したがって次数がなるべく小さい行列を与えるようなものとして，$n=m=1$，$n=m=2$ という二つの可能性を考えてみよう[1]．α_y も α_z も (52.8) と同じような形に書けることは明らかである．

$n=m=1$ の場合には (52.6) や (52.8) のような形をもった三つの互いに反可換な行列が存在することはすでに示しておいた．それは (41.3) の Pauli のスピン行列

$$\sigma_x=\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix}, \qquad \sigma_y=\begin{pmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{pmatrix}, \qquad \sigma_z=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix} \tag{52.10}$$

であって，これらは

$$\sigma_x\sigma_y=-\sigma_y\sigma_x=i\sigma_z \tag{52.11}$$

および，x, y, z を順次入れかえて得られる二つの同様な関係をみたしている．2行2列の行列はいずれも四つの元素をもっているから，一次独立的な四つの行列 $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ および1の1次結合として表わすことができる．その場合 (52.10) に与えられている三つのマトリックスのすべてと反可換であるような第四の行列が実際存在しないということは容易に示される．

そこで $n=m=2$ の場合を考えてみよう．この場合簡単のために $\alpha_{x1}=\alpha_{x2}$ 等と取っておくことにする．すると (52.9) 式は $\alpha_{x1}{}^2=1$ となり $\alpha_x\alpha_y+\alpha_y\alpha_x=0$ という関係は $\alpha_{x1}\alpha_{y1}+\alpha_{y1}\alpha_{x1}=0$ に帰着する．これらの式と，x, y, z を順次に入れかえて得られる同じような関係式とをみれば，α_{x1} 等が σ_x 等と実際は全く同一物であるということを直ちに確認することができる．こうして β, α に対する次のような具体的な行列表示

1) もっと次数の高い行列は $\frac{1}{2}$ 以上のスピンの粒子に対応している．

を構成してやることができる：

$$\beta=\begin{bmatrix}1&0&0&0\\0&1&0&0\\0&0&-1&0\\0&0&0&-1\end{bmatrix},\quad \alpha_x=\begin{bmatrix}0&0&0&1\\0&0&1&0\\0&1&0&0\\1&0&0&0\end{bmatrix}$$
$$\alpha_y=\begin{bmatrix}0&0&0&-i\\0&0&i&0\\0&-i&0&0\\i&0&0&0\end{bmatrix},\quad \alpha_z=\begin{bmatrix}0&0&1&0\\0&0&0&-1\\1&0&0&0\\0&-1&0&0\end{bmatrix} \tag{52.12}$$

これらの行列は明らかにエルミチアンであって，簡単に書き表わせば，

$$\beta=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix},\qquad \alpha=\begin{bmatrix}0&\boldsymbol{\sigma}\\\boldsymbol{\sigma}&0\end{bmatrix} \tag{52.13}$$

勿論この各“要素”は2行2列の行列である[1]．

52-3　自由粒子に対する解

α と β とが行列で表わされている以上，波動関数自身も4行1列の行列で表わされていない限り，方程式 (52.3) は意味をもたないことになる：

$$\psi(\mathbf{r},t)=\begin{bmatrix}\psi_1(\mathbf{r},t)\\\psi_2(\mathbf{r},t)\\\psi_3(\mathbf{r},t)\\\psi_4(\mathbf{r},t)\end{bmatrix} \tag{52.14}$$

そうすると (52.3) はこの四つの ψ に関する線型同次の連立一階偏微分方程式に等価である．

今 u_j を数とすれば

$$\psi_j(\mathbf{r},t)=u_j\exp i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\omega t),\qquad j=1,2,3,4 \tag{52.15}$$

という形の平面波の解を求めることができる．これらの ψ_j は (51.3) のエネルギーおよび運動量演算子の固有関数であって，その固有値はそれぞれ $\hbar\omega$, $\hbar\mathbf{k}$ になっている．(52.15) と (52.12) を (52.3) に代入すると，u_j に対して，次のような一組の代数方程式が得られる．ただしここでは $E=\hbar\omega$ および $\mathbf{p}=\hbar\mathbf{k}$ は単なる数になっている：

1)　Dirac 方程式の相対論的性格は，(52.3) に左からを β かけると一層明確になる．すなわち四つの行列 β, $\beta\alpha$ は四つの行列 β, α と同一の性質を持っているから，空間微分と時間微分との間の対称性が強調されるのである．

$$
\begin{aligned}
&(E-mc^2)u_1-cp_zu_3-c(p_x-ip_y)u_4=0\\
&(E-mc^2)u_2-c(p_x+ip_y)u_3+cp_zu_4=0\\
&(E+mc^2)u_3-cp_zu_1-c(p_x-ip_y)u_2=0\\
&(E+mc^2)u_4-c(p_x+ip_y)u_1+cp_zu_2=0
\end{aligned}
\qquad (52.16)
$$

これらの方程式は u_j に関する同次方程式であって，その係数の行列式が 0 である場合に限って解が存在する．この行列式は $(E^2-m^2c^4-c^2\mathbf{p}^2)^2$ となるから，E と $\mathbf{p}$ との間の関係は (51.2) と一致している．

エネルギーの符号を定めると，任意の運動量 $\mathbf{p}$ に対しての具体的な解を求めることができる．たとえば $E_+=+(c^2\mathbf{p}^2+m^2c^4)^{\frac{1}{2}}$ とすると，二つの一次独立な解が存在する．便宜上それらを次のように書くことにする：

$$
\begin{aligned}
&u_1=1, \quad u_2=0, \quad u_3=\frac{cp_z}{E_++mc^2}, \quad u_4=\frac{c(p_x+ip_y)}{E_++mc^2}\\
&u_1=0, \quad u_2=1, \quad u_3=\frac{c(p_x-ip_y)}{E_++mc^2}, \quad u_4=-\frac{cp_z}{E_++mc^2}
\end{aligned}
\qquad (52.17)
$$

同様に負の平方根 $E_-=-(c^2\mathbf{p}^2+m^2c^4)^{\frac{1}{2}}$ をとれば，同じようにして二つの新しい解が得られる．便宜上それを次のように書く．

$$
\begin{aligned}
&u_1=\frac{cp_z}{E_--mc^2}, \quad u_2=\frac{c(p_x+ip_y)}{E_--mc^2}, \quad u_3=1, \quad u_4=0\\
&u_1=\frac{c(p_x-ip_y)}{E_--mc^2}, \quad u_2=-\frac{cp_z}{E_--mc^2}, \quad u_3=0, \quad u_4=1
\end{aligned}
\qquad (52.18)
$$

これらの四つの解はそれぞれ，$\psi^\dagger\psi=1$ が成立するという意味において規格化することができる．それには $\{1+[c^2\mathbf{p}^2/(E_++mc^2)^2]\}^{-\frac{1}{2}}$ という因子をかけておけばよい．たゞし，$\psi^\dagger$ は ψ のエルミット共軛で，1 行 4 列の行列である．

(52.17) および (52.18) がそれぞれ正および負のエネルギーに対応する解であることは明らかである．非相対論的な極限をとれば $E_+=-E_-$ が mc^2 に近い大きさを持ちかつ $c|\mathbf{p}|$ に比べて大きいので，正のエネルギーに対する解では u_3 と u_4 とが u_1 または u_2 の v/c 程度の大きさになり（v は粒子の速さ），負のエネルギーをもつ解ではその逆になる．エネルギーの符号を同じくする二つの解の間に存する物理的な差異を明らかにするには，次のように定義される三つの新しい 4 行 4 列のスピン行列 σ_x', σ_y', σ_z' すなわち

$$\boldsymbol{\sigma}'=\begin{bmatrix}\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & \boldsymbol{\sigma}\end{bmatrix} \tag{52.19}$$

を導入すればよい．$\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}'$ という演算子は，スピン角運動量を表わすものであると解釈できるのであるが，このことについては §53 の初めにおいて触れることにする．波動関数の小さい成分が無視できる時には ψ は σ_z' の固有関数であって，(52.17) および (52.18) のそれぞれ一対の解のうち，第一式は共に固有値 $+1$ に対応し，第二式は固有値 -1 に対応していることは容易に示されるところである．

52-4 荷電と電流の密度

保存方程式を得るには，(52.3) の第二式に左から $\psi^\dagger$ をかけ，またそのエルミット共軛方程式

$$-i\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}-i\hbar c(\nabla\psi^\dagger)\cdot\boldsymbol{\alpha}-\psi^\dagger\beta mc^2=0$$

に右から ψ をかけて，両者の差をとればよい．そこで実の量

$$P(\mathbf{r},t)=\psi^\dagger\psi \qquad \mathbf{S}(\mathbf{r},t)=c\psi^\dagger\boldsymbol{\alpha}\psi \tag{52.20}$$

を定義すれば (51.7) 式が得られるのである．この P に対する表式の非相対論的形式は (7.1) になる；これは決して負になることはないから，位置の確率密度と解釈できる．$\mathbf{S}$ に対する (52.20) の表式は，非相対論的な極限において (7.3) に帰着することも証明することができる (問題 6 参照)．

(52.20) の第二式は演算子 $c\boldsymbol{\alpha}$ を粒子の速度として解釈をすることができることを示唆している．このことを確かめるには，Heisenberg 流の見方での (24.10) 式を使って，位置ベクトル $\mathbf{r}$ の時間微分を計算してやればよい．すなわち (52.2) のハミルトニアンと (24.31) の交換関係とによって

$$\frac{dx}{dt}=\frac{1}{i\hbar}(xH-Hx)=c\alpha_x \tag{52.21}$$

となる．

52-5 電磁ポテンシャル

波動方程式 (52.3) で記述される粒子が荷電 e をもっているときには，常套的手段として，$c\mathbf{p}\to c\mathbf{p}-e\mathbf{A}$，$E\to E-e\phi$ という置き換えを採用すれば，相対論的不変性を破壊

しないで電磁ポテンシャルを (52.3) に含ませることができる．すなわち，その結果は

$$[E-e\phi-\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})-\beta mc^2]\psi=0 \qquad (52.22)$$

となる．ここのEと$\mathbf{p}$とは (51.3) の演算子を表わしている．この式に左から $[E-e\phi+\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})+\beta mc^2]$ をかけると，(51.10) によく似た形に帰着させることができ，その結果は次のようになる．

$$\{(E-e\phi)^2-[\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})]^2-m^2c^4$$
$$-(E-e\phi)\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})+\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})(E-e\phi)\}\psi=0 \qquad (52.23)$$

(52.23) における第二の演算子は次のような関係を利用して簡略化することができる．

$$(\boldsymbol{\alpha}\cdot B)(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{C})=\mathbf{B}\cdot\mathbf{C}+i\boldsymbol{\sigma}'\cdot(\mathbf{B}\times\mathbf{C}) \qquad (52.24)$$

ここで$\mathbf{B}$と$\mathbf{C}$とはともに$\boldsymbol{\alpha}$と可換であるが，お互同志の間では必ずしも可換である必要はない (問題7参照)．ここでまず$\mathbf{B}$も$\mathbf{C}$もともに$(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})$とおき，さらに (24.30) を使って得られる次の関係が必要である．

$$(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})\times(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})=-ce(\mathbf{A}\times\mathbf{p}+\mathbf{p}\times\mathbf{A})=ie\hbar c\nabla\times\mathbf{A}=ie\hbar c\mathbf{H}$$

この結果を代入すれば (52.23) は次のように書き換えられる．

$$[\boldsymbol{\alpha}\cdot(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})]^2=(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2-e\hbar c\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{H}$$

また (52.23) の最後の二つの演算子は，もう一度 (24.30) を使って

$$e\boldsymbol{\alpha}\cdot(E\mathbf{A}-\mathbf{A}E)+ce\boldsymbol{\alpha}\cdot(\phi\mathbf{p}-\mathbf{p}\phi)$$
$$=ie\hbar\boldsymbol{\alpha}\cdot\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}+ie\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\nabla\phi=-ie\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E}$$

と書き換えられ，結局 (52.23) 式は

$$[(E-e\phi)^2-(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})^2-m^2c^4+e\hbar c\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{H}-ie\hbar c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E}]\psi=0 \qquad (52.25)$$

となる．ここで最初の3項は (51.10) と全く同一である．ところで後の2項の物理的意味を，方程式全体の非相対論的な極限を考えることによって明らかにすることにしよう．

このためには (51.10) 式の非相対論的極限を取った場合と全く同様なやり方で進めばよいはずであるが，ここでは少し違ったやり方をしてみよう．まず

$$E=E'+mc^2 \qquad (52.26)$$

とおき，E' と $e\phi$ とはいずれも mc^2 に比べて十分小さいと仮定することにする；この

仮定は（51.11）の置き換えやその後の近似と同等なものである．そうすると（52.25）において

$$(E-e\phi)^2-m^2c^4\approx 2mc^2(E'-e\phi)$$

と置き換えることができて

$$E'\psi=\left[\frac{1}{2m}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2+e\phi-\frac{e\hbar}{2mc}\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{H}+\frac{ie\hbar}{2mc}\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E}\right]\psi \qquad (52.27)$$

が得られる．ψ から $e^{-imc^2t/\hbar}$ という因子を取り去ると，E' は時間に関する微分演算子 $i\hbar(\partial/\partial t)$ と同等になり，結局（52.27）は非相対論的 Schrödinger 方程式（24.39）に対して，$\mathbf{H}$ と $\mathbf{E}$ とを生のままの形で含んでいる二つの項を付け加えたものとなる．

$\mathbf{H}$ を含む項は能率 $(e\hbar/2mc)\boldsymbol{\sigma}'$ の磁気双極子にともなうエネルギーの形をしている．さて，（52.18）式で自由粒子に対して明らかにしておいたように，非相対論的極限での正エネルギーの解については，その波動関数の第一，第二成分が第三，第四成分に比べて大きくなっている．（52.22）という一般的な方程式の構造をみれば，このことが，粒子に力が働いている場合にも同様に成り立っていることを示すのは難しいことではない．また（52.19）式からわかることは四成分の波動関数に $\boldsymbol{\sigma}'$ をかけることは，その大きい成分だけに $\boldsymbol{\sigma}$ をかけることと等価である．したがって $\mathbf{H}$ の項をもつ方程式（52.27）のうち，大きい二成分をとればこれは丁度 Pauli のスピン行列と電子の磁気能率に対する正確な係数とを含んだ非相対論的方程式を与えている［（48.10）式を見よ．この式では電子の荷電は $-e$ になっている．］

さて次に，実際の場合（52.27）の $\mathbf{E}$ の項は $e\phi$ の項の $(v/c)^2$ 倍程度の大きさであって，非相対論的極限においては無視してよいということが示される[1]．まず第一に気がつくことは（52.13）から明らかなように $\boldsymbol{\alpha}$ という演算子によって ψ の大きい成分と，小さい成分とが混ぜ合わされる（またすでに知っているように，$c\boldsymbol{\alpha}$ は速度演算子になる）ということから演算子 $\boldsymbol{\alpha}$ の期待値は，$(v/c)\int\psi^\dagger\psi\, d^3r$ 程度の大きさの量である．またそのさしわたしが a で表わされるような系に含まれている電子に対しては，$e\phi$ は $e\mathbf{E}a$ の程度であり，また $\hbar/a\sim p\sim mv$ が成り立っている．したがって（52.27）における $\mathbf{E}$ の項の $e\phi$ の項に対する比は

1）球対称な静電ポテンシャルの場合，この項からスピン-軌道相互作用のエネルギーが導かれ，実際そのオーダーは $(v/c)^2e\phi$ 程度になる；（53.8）式を見よ．

$$\frac{e\hbar v\mathsf{E}}{mc^2}\frac{1}{e\mathsf{E}a}\sim\frac{v^2}{c^2}$$

の程度になる．これに反して，すでに（48.9）と（48.10）で見たように，（52.27）の H の項は $\mathbf{A}$ に関して一次の他の磁気的な項と同じ程度の大きさである．したがって，一貫して非相対論的な近似をとる場合には（52.27）から E の項を落さねばならないが，Lorentz 不変性を保つことが要求される相対論的方程式（52.25）では，これを落すことはできないのである．

53□中心力場に対する Dirac 方程式

前節で述べたように，電子が磁気能率をもっているということは，波動方程式の非相対論的近似をとった際に期待通りの磁気エネルギーに対応するような余分の項が表われてくることによってはっきり示されたわけである．しかし電子のスピンはそれ自体でエネルギーを担っているわけではなく，それが観測にかかりうるのはそれが電子の軌道運動と結合されている場合に限るのである．この節の前半では，この結合の様子を二つの観点から明らかにしよう：すなわち一つは全角運動量の保存の概念であり，他の一つは§47 で導入したスピン-軌道エネルギーである．このいずれの場合にも，電子との間に角運動量の授受が起こらないようなポテンシャル $\mathbf{A}, \phi$ を取扱うのであるが，これはいいかえれば，中心力の場（$\mathbf{A}=0, \phi$ は球対称）に他ならないわけである．この節の後の部分では，一般的な中心力場に対する Dirac 方程式を変数分離した上で，水素原子のエネルギー準位を計算することにする．

53-1　スピン角運動量

$\mathbf{A}(\mathbf{r},t)=0,\ \phi(\mathbf{r},t)=\phi(r)$ という特別な場合には（52.22）式は次のように書くことができる．

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}&=H\psi \\ H&=c\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}+\beta mc^2+V \end{aligned} \qquad (53.1)$$

ただし $V=e\phi$ である．こういう中心力場では，軌道角運動量 $\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ は運動の恒量になっていると考えてよさそうだが，この点を調べるため，Heisenberg 流の見方をと

った (24.10) と (24.31) によって $\mathbf{L}$ の時間的な変化の割合を計算してみる. $\mathbf{L}$ は $V(r)$ のような球対称な関数とはどれとも交換可能であるから

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{dL_x}{dt} &= L_xH - HL_x \\ &= c\boldsymbol{\alpha}\cdot[(yp_z - zp_y)\mathbf{p} - \mathbf{p}(yp_z - zp_y)] \\ &= -i\hbar c(\alpha_z p_y - \alpha_y p_z) \end{aligned} \tag{53.2}$$

となって, 明らかに $\mathbf{L}$ は H とは交換可能ではなく, したがって $\mathbf{L}$ は運動の恒量になっていない. しかし, 物理的な根拠からすれば, 中心力場で運動の恒量になっているような全角運動量が当然定義されてしかるべきであると考えられる. このことは, その x 成分と H との交換子をとれば (53.2) の右辺に負号をつけたものを与えるような演算子をもう一つ見つけてこなければならないということを意味している. そうすればこの演算子と $\mathbf{L}$ との和は運動の恒量であって, 全角運動量という解釈がつくわけである.

さて, 求める演算子としては (52.19) で定義された $\boldsymbol{\sigma}'$ のある定数倍をとっておけばよいことが簡単に確かめられる. (52.11) と (52.13) とによれば, $\boldsymbol{\sigma}_x'$ は α_x および β とは交換可能であっても, $\boldsymbol{\alpha}$ の他の成分とは交換可能でないことが示される:

$$\begin{aligned} \sigma'_x\alpha_y - \alpha_y\sigma'_x &= \begin{bmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{bmatrix}\begin{bmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & \sigma_y \\ \sigma_y & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} \sigma_x & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} 0 & i\sigma_z \\ i\sigma_z & 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 & -i\sigma_z \\ -i\sigma_z & 0 \end{bmatrix} = 2i\alpha_z \end{aligned}$$

この関係を使えば $\boldsymbol{\sigma}'$ の時間的変化の割合を求めることができて,

$$i\hbar\frac{d\sigma'_x}{dt} = \sigma'_xH - H\sigma'_x = 2ic(\alpha_z p_y - \alpha_y p_z) \tag{53.3}$$

となる. (53.2) と (53.3) とをみれば $\mathbf{L} + \frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}'$ という量は明らかに H と交換可能であり, したがってこれを全角運動量とみることができる. そこで

$$\mathbf{S} = \tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}' \tag{53.4}$$

という演算子を電子のスピン角運動量とよぶことにする.

53-2 二成分近似; スピン-軌道エネルギー

ここではスピン-軌道エネルギー (47.13) が Dirac 方程式からの一つの帰結になることを示すことにしよう. まずこの項は次のように位置エネルギーの $(v/c)^2$ 程度の大きさになっていることが示される:

$$\frac{1}{V}\frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}(\mathbf{L}\cdot\mathbf{S})\sim\frac{1}{V}\frac{1}{m^2c^2}\frac{V}{a^2}pa\hbar\sim\frac{v^2}{c^2}$$

ここで a はこの系全体の一次元での拡りを表わす長さであって，さらに

$$\frac{\hbar}{a}\sim p\sim mv$$

が成り立っているとしてある．したがって当然 (52.27) を導く際に用いたような近似法はこゝでの目的に対して適切なものとは思われない．

さて元々の四成分に比べてずっと用い慣れた二成分波動関数を使ってあらわされる一貫した近似を求めるために，まず，(53.1) の ψ を二つの部分 ψ_1, ψ_2 に分解しよう．ここで ψ_1, ψ_2 は ψ の初めの二つおよび，終りの二つの成分をそれぞれ表わしている．今 ψ_1 と ψ_2 とが合して非相対論的なエネルギー固有関数を構成するものと仮定しよう．すると

$$E=E'+mc^2$$

は演算子でなく単なる数とみなしてよいことになる；勿論あとになって，E' と V とは mc^2 に比べて十分小さいものと仮定するわけである．したがって波動方程式は書き直されて

$$\begin{aligned}&(E'-V)\psi_1-c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\psi_2=0\\&(E'+2mc^2-V)\psi_2-c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\psi_1=0\end{aligned}\tag{53.5}$$

となるが，この $\mathbf{p}$ はまだ演算子である．この第二式によれば，ψ_2 は ψ_1 の v/c 倍程度の大きさであることが明らかであるから，ψ_2 を消去して ψ_1 だけに関する方程式を求めてみよう．(53.5) の第一式に

$$\psi_2=(E'+2mc^2-V)^{-1}c\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}\psi_1$$

を代入すると

$$E'\psi_1=\frac{1}{2m}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\left(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\right)^{-1}(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p})\psi_1+V\psi_1\tag{53.6}$$

が得られるが，ここまでの計算においては，全然近似を導入していないことに注意すべきである．

さてここで求めている近似としては，これを $(E'-V)/2mc^2$ のベキに展開して，その最低次の項までとっておけばよいのである．次の諸関係は容易に確かめられる：

$$\left(1+\frac{E'-V}{2mc^2}\right)^{-1}\approx 1-\frac{E'-V}{2mc^2}$$

$$\mathbf{p}V = V\mathbf{p} - i\hbar\nabla V$$

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla V)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{p}) = (\nabla V)\cdot\mathbf{p} + i\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\nabla V)\times\mathbf{p}]$$

これらを使うと，(53.6) は

$$E'\psi_1 = \left[\left(1-\frac{E'-V}{2mc^2}\right)\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+V\right]\psi_1 - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}(\nabla V)\cdot(\nabla\psi_1) + \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot[(\nabla V)\times\mathbf{p}\psi_1] \tag{53.7}$$

となる．

V が球対称である場合にはこれをさらに簡単化することができる．まず次の関係

$$(\nabla V)\cdot\nabla = \frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r}$$

$$\nabla V = \frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{r}$$

を用い，さらに $E'-V$ がほぼ $\mathbf{p}^2/2m$ に等しいのであるから，(53.7) において二次の項 $(E'-V)\mathbf{p}^2$ を $\mathbf{p}^4/2m$ で置き換えても十分正確であることに注意すれば，(53.7) は，$\mathbf{S}=\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$，$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ として，結局

$$E'\psi_1 = \left[\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2} + V - \frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\frac{dV}{dr}\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{2m^2c^2}\frac{1}{r}\frac{dV}{dr}\mathbf{S}\cdot\mathbf{L}\right]\psi_1 \tag{53.8}$$

と書き換えられる．

(53.8) の右辺の第一項と第三項とは非相対論的 Schrödinger 方程式になるものである．第二項は古典的な相対論的質量補正の形をしている．すなわち，次のように (51.2) の平方根を展開すれば得られるものになっている．

$$E' = E - mc^2 = (c^2\mathbf{p}^2 + m^2c^4)^{\frac{1}{2}} - mc^2 \approx \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\mathbf{p}^4}{8m^3c^2}$$

(53.8) の最後の項は (47.14) に与えたスピン-軌道エネルギーであって，この場合には Dirac 方程式からの直接の帰結として自動的に導かれることがわかる．また第四項も同様に位置エネルギーに対する相対論的補正であるが古典論においてはこれに対応するものは存在しない．さらにこの項は角運動量を含んでいないから，この効果を実験的に検証することはスピン-軌道エネルギーよりずっと困難である[1]．

---

1) この項に関するより詳しい議論については次のものを見よ．E. U. Condon and G. H. Shortley, "The Theory of Atomic Spectra" (Cambridge, London, 1935) の 130頁．

53-3　方程式の変数分離

中心力場に対する Dirac 方程式は球面座標を採用すれば，何ら近似をとることなしに変数分離を行なうことができる．しかしこの場合には軌道角運動量とスピン角運動量とが互いに関連し合っているので，非相対論的および相対論的 Schrödingr の方程式のいずれの場合に比べても手続きが複雑になっている．まず動経方向の運動量および速度の演算子の定義から出発する：

$$p_r=r^{-1}(\mathbf{r}\cdot\mathbf{p}-i\hbar),\qquad \alpha_r=r^{-1}(\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{r}) \tag{53.9}$$

これらはいずれもエルミット演算子であることが証明できる．また次のような演算子 k を定義すれば，これは全角運動量に関連していることはすぐにわかる：

$$\hbar k=\beta(\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{L}+\hbar) \tag{53.10}$$

勿論ここで，$\mathbf{L}=\mathbf{r}\times\mathbf{p}$ である．これを直接代入して（52.24）を使えば次の式が証明される：

$$\alpha_r p_r+i\hbar r^{-1}\alpha_r\beta k=\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{p}$$

するとハミルトニアン（53.1）は

$$H=c\alpha_r p_r+\frac{i\hbar c}{r}\alpha_r\beta k+\beta mc^2+V \tag{53.11}$$

となる．また（53.9）と（53.10）の定義式および §52 の諸関係に注意すれば，次の関係を確かめることができる．

$$\alpha_r k-k\alpha_r=0,\qquad \beta k-k\beta=0,\qquad p_r k-kp_r=0$$
$$\alpha_r p_r-p_r\alpha_r=0$$

これらの関係から k がハミルトニアン（53.11）と交換可能であり，したがって運動の恒量になっていることがわかる．k の固有値を求めるため（53.10）を2乗してみると，

$$\hbar^2k^2=(\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{L})^2+2\hbar(\boldsymbol{\sigma}'\cdot\mathbf{L})+\hbar^2=(\mathbf{L}+\tfrac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}')^2+\tfrac{1}{4}\hbar^2 \tag{53.12}$$

となる．$(\mathbf{L}+\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}')^2$ は全角運動量の2乗であって，その固有値は j を正の半奇数として $j(j+1)\hbar^2$ なのであるから，したがって k^2 の固有値は $(j+\frac{1}{2})^2$ となり，結局 k は $\pm1, \pm2, \cdots$ の値をとりうる．

そこでHと k とが対角化されていて，それぞれ E, k という数で表わされているような表示を選ぶことにしよう．すると α_r と β とは

$$\alpha_r{}^2=\beta^2=1,\qquad \alpha_r\beta+\beta\alpha_r=0$$

の関係をみたすような任意のエルミット行列で表現されることになる．これに対する証明はさほど難しいものではない．このような行列は2行2列ものでよく，たとえば

$$\beta=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{bmatrix},\qquad \alpha_r=\begin{bmatrix}0 & -i\\ i & 0\end{bmatrix} \tag{53.13}$$

ととることができる．さて波動関数の角部分，およびスピンに関する部分はψが (53.10) の演算子kに対する固有関数になっていることを要請すれば確定されてしまう．エネルギー準位の計算のような目的に対しては波動関数の動経部分を考えるだけでよい；ところで (53.13) の構造からして，この動経部分は二つの成分をもっていて，次のように書くことができる．

$$\begin{bmatrix}r^{-1}F(r)\\ r^{-1}G(r)\end{bmatrix} \tag{53.14}$$

(53.13) と (53.14) とを (53.11) のハミルトニアンをもつ波動方程式に代入すると，中心力場を運動している電子に対する動径方程式が得られる．

$$p_r=-i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r}\right)$$

という関係を使えば，動径方程式として

$$\begin{aligned}(E-mc^2-V)F+\hbar c\frac{dG}{dr}+\frac{\hbar ck}{r}G=0\\ (E+mc^2-V)G-\hbar c\frac{dF}{dr}+\frac{\hbar ck}{r}F=0\end{aligned} \tag{53.15}$$

が得られるが，さらに便宜上，

$$\begin{aligned}&\alpha_1=\frac{mc^2+E}{\hbar c},\qquad \alpha_2=\frac{mc^2-E}{\hbar c},\qquad \rho=\alpha r\\ &\alpha=+(a_1\alpha_2)^{\frac{1}{2}}=\frac{(m^2c^4-E^2)^{\frac{1}{2}}}{\hbar c}\end{aligned} \tag{53.16}$$

という数値的な置き換えを行なえば (53.15) は結局

$$\begin{aligned}\left(\frac{d}{d\rho}+\frac{k}{\rho}\right)G-\left(\frac{\alpha_2}{\alpha}+\frac{V}{\hbar c\alpha}\right)F=0\\ \left(\frac{d}{d\rho}-\frac{k}{\rho}\right)F-\left(\frac{\alpha_1}{\alpha}-\frac{V}{\hbar c\alpha}\right)G=0\end{aligned} \tag{53.17}$$

となる．

53-4 水素原子

ここで $V(r)=-Ze^2/r$ のときの (53.17) のエネルギー固有値を求めてみよう；まず $\gamma\equiv Ze^2/\hbar c$ とおくと，$V/\hbar c\alpha$ という量は $-\gamma/\rho$ と表わされる．§16 と同様の手順をふんでゆくことにして，

$$F(\rho)=f(\rho)e^{-\rho}, \qquad G(\rho)=g(\rho)e^{-\rho} \tag{53.18}$$

とおくと，f と g に対する方程式は

$$\begin{aligned} g'-g+\frac{kg}{\rho}-\left(\frac{\alpha_2}{\alpha}-\frac{\gamma}{\rho}\right)f=0 \\ f'-f-\frac{kf}{\rho}-\left(\frac{\alpha_1}{\alpha}+\frac{\gamma}{\rho}\right)g=0 \end{aligned} \tag{53.19}$$

となる．そこで，この方程式の解を，次のようなベキ級数展開の形に仮定してみよう．

$$\begin{aligned} f=\rho^s(a_0+a_1\rho+\cdots), \qquad a_0\neq 0 \\ g=\rho^s(b_0+b_1\rho+\cdots), \qquad b_0\neq 0 \end{aligned} \tag{53.20}$$

(53.14) は $r=0$ で有限であることが予想されるから，s は1に等しいかあるいはそれよりも大きいものと考えられる．しかしクーロン場に対する Schrödinger の相対論的方程式 (51.15) の解の場合と同様に考えて，1より少し小さい s の価をも認めることにしよう．

(53.20) を (53.19) に代入して，$\rho^{s+\nu-1}$ の係数を0とおくと，$\nu>0$ に対しては

$$\begin{aligned} (s+\nu+k)b_\nu-b_{\nu-1}+\gamma a_\nu-\frac{\alpha_2}{\alpha}a_{\nu-1}=0 \\ (s+\nu-k)a_\nu-a_{\nu-1}-\gamma b_\nu-\frac{\alpha_1}{\alpha}b_{\nu-1}=0 \end{aligned} \tag{53.21}$$

が得られる．$\nu=0$ のとき，これに相当するものは，

$$\begin{aligned} (s+k)b_0+\gamma a_0=0 \\ (s-k)a_0-\gamma b_0=0 \end{aligned} \tag{53.22}$$

であって，これが a_0 と b_0 とに対し，要求される通りに0以外の解をもつのは，係数行列式が0になるときに限られる．このことから

$$s=\pm(k^2-\gamma^2)^{\frac{1}{2}} \tag{53.23}$$

となり，原点での境界条件により，このうち正符号のものを s としてとることにする．

(53.21) の第一式に α，第二式に α_2 をかけて両者の差をとり，(53.16) を使え

ば，a_ν と b_ν との間の関係が得られる：

$$b_\nu[\alpha(s+\nu+k)+\alpha_2\gamma]=a_\nu[\alpha_2(s+\nu-k)-\alpha\gamma] \tag{53.24}$$

これらの関係を使えば，r が大きいところでの解の様子を調べることができる．もし (53.20) の二つの級数が有限項できれない場合には，解の様子は高ベキの項によって決定されるから，ν を残して定数因数を無視することができる．したがって (53.21) と (53.24) とから

$$a_\nu\approx\frac{2}{\nu}a_{\nu-1},\qquad b_\nu\approx\frac{2}{\nu}b_{\nu-1}$$

が得られるが，これらはいずれの級数も $e^{2\rho}$ という漸近形をもつことを意味している．したがって，級数が有限項にとどまる場合に限って正則な解が得らることになる．かりに $\nu=n'$ において級数が終り，したがって $a_{n'+1}=b_{n'+1}=0$ となっているものと考えれば，(53.21) の両式から

$$\alpha_2a_{n'}=-\alpha b_{n'},\qquad n'=0,1,2\cdots \tag{53.25}$$

という関係が得られる．

(53.24) において $\nu=n'$ とおき，(53.25) を使えばエネルギー準位を求めることができる．すなわち (53.16) を使って

$$2\alpha(s+n')=\gamma(\alpha_1-\alpha_2)=\frac{2E\gamma}{\hbar c}$$

となるが，この結果はたまたま $E>0$ であることを示している．なお，この結果を2乗すると，

$$(m^2c^4-E^2)(s+n')^2=E^2\gamma^2$$

となり，これは E について簡単に解くことができて，その結果は

$$E=mc^2\left[1+\frac{\gamma^2}{(s+n')^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \tag{53.26}$$

となる．(53.23) と (53.26) 式とは，Sommerfeld によって古典量子論の立場からはじめて導かれた公式と同等である[1]．この公式は水素原子のスペクトルを極めてよく説明している[2]．(53.26) を γ^2 のベキに展開するとエネルギー準位の微細構造が明らかになる．これを γ^4 の項までとった結果は (51.21) と似ているが，全く同一というわけで

1) A. Sommerfeld, *Ann. Physik.* **51**, 1 (1916).

2) ただし，この公式からの小さな，しかし重要なずれが見出されている．それについては次のものをみよ W. E. Lamb, *Rept. on Prog. Phys.* **14**, 19 (1951).

はない：すなわち

$$E=mc^2\left[1-\frac{\gamma^2}{2n^2}-\frac{\gamma^4}{2n^4}\left(\frac{n}{|k|}-\frac{3}{4}\right)\right] \tag{53.27}$$

ここで $n=n'+|k|$ は (16.14) 式の全量子数であって，$|k|$ は正の整数値をとりうる．あるきまった n に対して微細構造準位の全体のエネルギーについての幅は (53.27) から容易にわかるように

$$\frac{mc^2\gamma^4}{n^3}\frac{n-1}{2n}$$

で，この値は Schrödinger の相対論的方程式から求めた値 (51.22) より確かに小さくなっておりかつ実験と一致している．

53-5 エネルギー準位の分類

$n'>0$ の場合には k に対してすべての正負の整数値が許される [(53.12) で示されたように，k は 0 にはなり得ない]．しかし $n'=0$ の場合には，(53.22) と (53.25) との間に矛盾が生じ得る．すなわち各々から

$$\frac{b_0}{a_0}=-\frac{\gamma}{s+k} \quad および \quad \frac{b_0}{a_0}=-\frac{\alpha_2}{\alpha} \tag{53.28}$$

が得られるが，$s<|k|$ であるから始めの式は k の負または正にしたがって，正または負となるのに反して，後の式は常に負である．したがって $n'=0$ のときには，k は正の整数値のみをとり得るのである．

これまで述べてきたところでは準位の j の値に関しては，ただそれが $|k|-\frac{1}{2}$ に等しいということしか考えていなかったのであるが，l を準位と結びつけるためには軌道角運動量が独立に意味をもつような非相対論的近似をとらねばならない．この場合には (53.14) の F は G よりずっと大きいから，(53.10) において β を -1 に，$\boldsymbol{\sigma}'$ を $\boldsymbol{\sigma}$ に置き換えることができる．さてこの近似では $(\mathbf{L}+\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma})^2=[l(l+1)+\frac{3}{4}]\hbar^2+\hbar\boldsymbol{\sigma}\cdot\mathbf{L}$ であって，これはまた $j(j+1)\hbar^2$ に等しい．このようにして

$$k=j(j+1)-l(l+1)+\tfrac{1}{4}=\begin{cases} l+1 & j=l+\frac{1}{2} \\ -l & j=l-\frac{1}{2} \end{cases}$$

が得られる．

水素のエネルギー準位の一例として，$n=3$ の場合を考えよう．動径量子数 n' は 0，1 あるいは 2 で k は $\pm(3-n')$ である．ただし $n'=0$ の場合には $k=+3$ だけが

可能になる．非相対論的な立場から分類した準位は次の表のようになる．

n'	k	l	j	
0	3	2	$\frac{5}{2}$	$^2D_{\frac{5}{2}}$
1	-2	2	$\frac{3}{2}$	$^2D_{\frac{3}{2}}$
1	2	1	$\frac{3}{2}$	$^2P_{\frac{3}{2}}$
2	-1	1	$\frac{1}{2}$	$^2P_{\frac{1}{2}}$
2	1	0	$\frac{1}{2}$	$^2S_{\frac{1}{2}}$

(53.23) と (53.26) とによれば，同一の $|k|$，すなわち同一の j に属する状態のエネルギーは相等しい．(53.27) は $|k|$ が増すとともにエネルギーも増加することを示している．

53-6 負のエネルギーの状態

すでに述べたように，Schrödinger および Dirac の相対論的方程式はともに，粒子が負の運動エネルギーと負の静止質量をもつような解を許している．この種の解は古典的なエネルギー方程式 (51.2) の負の平方根に対応するものであるが，量子論においては，荷電粒子が正エネルギーの状態から負エネルギーの状態へと輻射を放出して遷移することを妨げるような事情は何ら認められないから，古典論の場合のように負エネルギーに対応する解を不問に付してしまうわけにはいかない．

これに対して Dirac は (52.22) の負エネルギー状態が，電子によってみたされているものと考える立場を提案した．そうすると排他原理にしたがって，このようにすでに占有されている状態に向って他の電子が遷移を起こすことは当然禁止されることになる．したがってこの立場からみれば真空の正常な状態というものは，無限の密度をもった負エネルギー電子の集団によって構成されているわけであるが，これらの電子に起因する電磁気的効果および重力的効果は全然存在せず，電子の負のエネルギー状態の一つ，またはそれ以上が空席にされたために起こる正常状態からのずれがはじめて観測にかかるものと仮定するのである．負の質量と負の運動エネルギーとをもつ1個の負の電荷の電子が空席になっている状態は，等量の正の質量と正の運動エネルギーを持つ1個の正に帯電した粒子として観測されるものと期待される．このようにして，**陽電子** ***positron*** の "空孔" 理論を定式化することができる．

しかしこのように多くの電子が同時に存在するのであるから，これを記述する理論はもはや，波動関数を作る際に考えられていたような1個の粒子に対する理論ではありえない．これにかわるべき多粒子の理論は，次の章で論じる量子化された場の理論の処方にしたがって，Dirac 方程式を基礎にして構成することができ，これをもとにすれば空孔という考えによることなしに陽電子の理論を展開することができるのである．

さて一見したところ，このような技巧は Schrödinger の相対論的波動方程式に対しては適用できないように思われるかもしれない．というのはこれがスピン0の粒子を表わしていて，排他原理ではなく Einstein-Bose 統計にしたがうものと考えられるからである．しかし Pauli と Weisskopf[1] は，この場合波動方程式に含まれるパラメーターEは正，負いずれの値をもとることができるにもかかわらず，量子化された場のエネルギーは常に正であることを示した．しかも，(51.8) 式の後で注意したように，Pの符号の不定性に対応して量子化された場の電荷は，正，負いずれの符号をとることもできるのである．したがって，この章で論じた二つの理論はいずれも，正のエネルギーと，正，負の電荷をもつ粒子の存在を予言している．Dirac 方程式からの帰結としてスピン角運動量が自動的に現われてくるということは，これが電子を記述する理論であることを示している．

問　題

1. (51.11) 式およびそれにつづく議論の中に示されている非相対論的近似を用いて，Pに対する表式 (51.8) が，適当な極限をとれば (7.1) に帰着することを示せ．

2. 深さ V_0，半径aの角井戸型の引力ポテンシャルに対する Schrödinger の相対論的方程式について，$r=a$ での連続条件を求めた上で，この方程式を解け．なおaが与えられているとき，質量mの粒子を丁度束縛するに足るような最小の V_0 を与える具体的な表式を導け．

3. aを極めて小さいとして $r<a$ に対しては $e\phi=-Ze^2/a$ で，$r>a$ に対しては $e\phi=-Ze^2/r$ であるようにポテンシャル・エネルギー ϕ に対応する Schrödinger の相対論的波動方程式の $r=0$ で有限の解を求めよ．ただし，rについてのそれぞれのベキ級数の最初の2項だけをとればよいことに注意すること．なお，$r>a$ に対する解は $a\to 0$ のとき (51.19) の上の方の符号に対応する解に近づいてゆくことを証明せよ．

4. 2行2列の行列であればどんなものでも $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ および1の一次結合として表わし得ることを証明せよ．この結果を用いて $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の各々と反可換であるような行列は存在しないことを

1) W. Pauli and V. Weisskopf, *Helv. Phys. Acta* **7**, 709 (1934).

示せ.

5. 波動関数 (52.17) および (52.18) は, スピン角運動量 $\frac{1}{2}\hbar\boldsymbol{\sigma}$ のどの成分の固有関数でもないことを具体的に示せ.

6. 自由粒子の波動関数に対する電流密度 (52.20) は, 適当な極限をとれば対応する非相対論的な表式に一致することを示せ.

7. (52.11), (52.13) および (52.19) を利用して, (52.24) を証明せよ.

8. (53.9) および (53.10) で定義される演算子 α_r と k とは互いに交換可能であること, および $\hbar^2k^2$ が (53.12) の右辺で与えられることを証明せよ.

9. (52.27) 式における $\boldsymbol{\alpha}\cdot\mathbf{E}$ の項と, スピン-軌道エネルギーとの関連性を論ぜよ.

10. (51.16) や (53.26) を導く際に現われてきてもよかった負の平方根は, 実際に束縛状態に対応していないことを証明せよ.

11. Schrödinger および Dirac の相対論的波動方程式に従う粒子がクーロン場において, $n=2$, $n=3$ の両状態間に遷移を起こすものとする. 選択則 $\Delta l=\pm1$, $\Delta j=0$, ±1 を用いて, 許容される遷移の振動数を表にしてまとめよ. 特に, Dirac の理論では 7 本の線が現われ, そのうち 5 本ははっきり分かれていることになるが, Schrödinger の理論ではそれよりずっと広くはなれている 3 本の線が現われることを示せ.

12. 深さ V_0, 半径 a の四角な井戸型の引力ポテンシャルに対する Dirac 方程式について $r=a$ での連続条件を求めた上で, この方程式を解け. なお, a が与えられているとき, 質量 m の粒子を丁度束縛するに足るような最小の V_0 を与える表式を求め, 問題 2 の答と比較せよ.

第XIV章　波動場の量子化

本書においてこれまでに取りあげてきた量子力学的理論というものは，専ら，その古典論的極限においては物質粒子から構成されているような体系に関するものであった．次にこの理論を拡張して，電磁場に対しても適用し得るようにし，その結果，輻射現象の量子論に対する首尾一貫した理論的基盤を提供することにしよう．さて，一般的に言って波動場を量子化すれば，これに対してある種の粒子的特性を付与することになるのであるが，特にこれを電磁場に対して適用すれば，光量子（すなわち光子）の理論が導かれるのである．ところが，場の量子化の手法というものは，また，非相対論的 Schrödinger 式 (6.16)，あるいは相対論的波動方程式 (51.4) および (52.3) によって記述される ψ 場に対しても等しく適用し得るものであって，非相対論的な場合においては以下で（§55）示されているように，その場合これらの単一粒子の理論は自動的に多粒子系の理論に転換されることになるのである．この転換はある面では (6.16) 式から (16.1) ないしは (40.7) への移行と等価なのである．さてこの等価性にのみ着目する限り，ψ 場の量子化ということはややもすれば結局単に多粒子系の理論を導入するための，もう一つの別種の形式的手段を提供するにすぎないものであると考えられるかもしれないが，ここに展開される新しい理論形式というものは，物質粒子の生成，消滅を含むような過程（放射性の β-崩壊，中間子-核子相互作用）をも含めて統一的に記述し得るものなのである．

本章は場の量子論に関する初歩的概念を与えることを目的としたものである[1]．まず §54 において，波動場に対する，古典論的運動方程式および量子論的運動方程式

---

1)　より詳しい議論に関しては P. A. M. Dirac, "The Principles of Quantum Mechanics," 4th ed., (Oxford, New York, 1958)〔邦訳既出〕の第X，XI章；H. Goldstein, "Classical Mechanics," chap. 11 (Addison-Wesley, Reading, Mass., 1950〔邦訳：野間・瀬川訳「古典力学」吉岡書店〕の第11章；J. D. Bjorken and S. D. Drell, "Relativistic Quantum Fields" (McGraw-Hill, New York, 1965)；E. Henley and W. Thirring, "Elementary Quantum Field Theory" (McGraw-Hill, New York, 1962)；S. S. Schweber, "An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory" (Harper & Row, New York, 1961)；J. J. Sakurai, "Advanced Quantum Mechanics" (Addison-Wesley, Mass., 1967) を参照のこと．

を，その場の特定の細い性格に立入ることなく一般的に論ずることから出発する．次の§54 で場の量子論の (6.16) 式に対する応用が最初の具体例として用いられている．それ以外に（相対論的な Schrödinger 方程式および Dirac 方程式を含む）いくつかの粒子の波動方程式もやはり量子化されているが，ここではとりあげていない．最後の2つの節では電磁場の量子化が考察されている．

54□古典場と量子場の方程式

古典論的な体系に対する運動方程式を量子化するための一般的な手続は，§24 で得られた通りである．まずこの系のラグランジアンから出発して，これが正しい古典論的方程式を与えることを確かめる．次にはこのラグランジアンから，系の座標に対して正準共役な運動量を求めて，これによってハミルトニアンを構成する．ついで古典論的なハミルトンの運動方程式において，その Poisson 括弧を交換関係で置き換えて，それを量子論的方程式に変換する．この結果は Heisenberg 流の見方での力学変数の時間に関する変化を与えることになる．さて，ここで示そうとするのは，こういった手続が波動場 $\psi(\mathbf{r},t)$ に対しても，そっくりそのまま適用できるということである．なお，$\psi(\mathbf{r},t)$ は，さし当り実関数であるものと考えておくことにする[1]．

54-1　場　の　座　標

波動場を規定するのは空間のすべての点におけるその振巾と，この振巾の時間的な変化の仕方とであるが，これは幾つかの粒子からなる体系が位置座標 q_i とその時間的変化とによって規定されるのと全く同じ事情である．さらに場は明らかに無限個の自由度をもっていて，無限個の粒子からなる系に相当しているから，§24 での粒子の座標 $q_i(t)$ に対応するものとして，すべての点 $\mathbf{r}$ における振巾 $\psi(\mathbf{r},t)$ を座標として採用するのがごく自然なゆき方である．

しかし，必ずしもこのように議論を進めてゆかなければならないというわけではなく，もう一つのゆき方として，ある完全規格直交関数系 u_k によって ψ を展開し，

$$\psi(\mathbf{r},t)=\mathrm{S}_k a_k(t)u_k(\mathbf{r}) \tag{54.1}$$

1) W. Heisenberg and W. Pauli, *Z. Physik* **56**, 1 (1929) ; **59**, 168 (1930).

その展開係数 a_k をもって場の座標とみなすこともできる．場の方程式は ψ を使って書き表わすこともできるし，また a_k を使っても書き表わすことができるわけである．この節では空間の各点における波動の振巾を場の座標として採用することにするが，展開係数 a_k を使う方が便利な場合も後でいくつかでてくることになる．

54-2 時間微係数

古典場と量子場の理論における時間についての微係数の意味をはっきりつかんでおくことは重要である．粒子の古典論では，時間についての全微係数と偏微係数は座標，運動量および時間のある関数 $F(q_i, p_i, t)$ に関連して定義されるものであった．そしてこれら2種の微係数の関係は (24.22) 式で与えられている．(粒子の量子論では) Heisenberg 流の見方に立てば両者の微分係数は全く同様に定義され，かつ両者の間の関係は(24.10) 式で与えられた．場の古典論では，q_i の対応物は $\psi(\mathbf{r})$ で，定義しうる時間微係数は $\partial\psi/\partial t$ だけであり，粒子の古典論の場合の $\dot{q}_i$ との類推からそれを $\dot{\psi}$ であらわして用いている．つまり古典場のハミルトンの運動方程式［後出の (54.19) 式］での $\dot{\psi}$ さらにはまた $\dot{\pi}$ は時間についての偏微係数として解釈されている．しかしながら，汎関数 $F(\psi, \pi, t)$ は場と同様に時間を直接含むことができる．したがって (54.20) 式で dF/dt と $\partial F/\partial t$ とを区別することが重要になるわけである．

同じ事情は場の量子論においても生じる．つまり，$d\psi/dt$ と $\partial\psi/\partial t$ とを区別することはできず，いずれも $\dot{\psi}$ で表わされる．他方，Heisenberg 流の見方での演算子は直接時間を含むことができ，それに対する2つの時間についての微係数の間の区別は (54.23) 式でなされなければならないのである．

54-3 古典論の Lagrange 方程式

§24 で用いたラグランジアン $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ は時間の関数であるとともに，また，系のとり得る軌道 $q_i(t)$ の汎関数でもある．実際に実現される軌道は (24.17) の変分原理から導かれる：

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L dt = 0, \qquad \delta q_i(t_1) = \delta q_i(t_2) = 0$$

さてこれから類推すれば場のラグランジアンは場の振巾 $\psi(\mathbf{r}, t)$ の汎関数になる

ことが期待される．通常それは**ラグランジアン密度** *Lagrangian density* $\boldsymbol{L}$ を全空間にわたって積分したものとして表わすことができる．

$$L=\int \boldsymbol{L}(\psi, \nabla\psi, \dot{\psi}, t)d^3r \tag{54.2}$$

ただし先に注意したように $\dot{\psi}$ は $\partial\psi/\partial t$ または $d\psi/dt$ である．なお，$\nabla\psi$ が $\boldsymbol{L}$ の引数としてあらわれているのは ψ が $\mathbf{r}$ について連続的に変化すること（連続無限個の自由度）に由来しているのであって，勿論 ψ の高次の微係数が入ってきてもよいわけであるが，物理的に興味のある問題に対しては，そのようなことは起こらないものと考えられる．ところで（24.17）に対応する変分原理は

$$\delta\int_{t_1}^{t_2} L\,dt=\delta\int_{t_1}^{t_2}\int \boldsymbol{L}\,dt\,d^3r=\int_{t_1}^{t_2}\int(\delta\boldsymbol{L})\,dt\,d^3r=0 \tag{54.3}$$

となる．ただし ψ の無限小変分 $\delta\psi$ には次の制限が課せられている：

$$\delta\psi(\mathbf{r}, t_1)=\delta\psi(\mathbf{r}, t_2)=0 \tag{54.4}$$

もし $\boldsymbol{L}$ が（54.2）に示されるような形式のものであるときには，その変分は

$$\delta\boldsymbol{L}=\frac{\partial\boldsymbol{L}}{\partial\psi}\delta\psi+\sum_{xyz}\frac{\partial\boldsymbol{L}}{\partial(\partial\psi/\partial x)}\delta\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)+\frac{\partial\boldsymbol{L}}{\partial\dot{\psi}}\delta\dot{\psi} \tag{54.5}$$

と書くことができる．x, y, z についての和は，x のかわりに y と z を入れた三つの項をとることを示している．この際 $\delta\dot{\psi}$ はもとの $\dot{\psi}$ と変化を受けた $\dot{\psi}$ との差であるから ψ の変分の時間微分になる．また $\delta(\partial\psi/\partial x)$ についても同じことが言えるのであって，これを式で表わせば

$$\delta\dot{\psi}=\frac{\partial}{\partial t}(\delta\psi) \qquad \delta\left(\frac{\partial\psi}{\partial x}\right)=\frac{\partial}{\partial x}(\delta\psi)$$

となる．したがって（54.3）は

$$\int_{t_1}^{t_2}\int\left[\frac{\partial\boldsymbol{L}}{\partial\psi}\delta\psi+\sum_{xyz}\frac{\partial\boldsymbol{L}}{\partial(\partial\psi/\partial x)}\frac{\partial}{\partial x}(\delta\psi)+\frac{\partial\boldsymbol{L}}{\partial\dot{\psi}}\frac{\partial}{\partial t}(\delta\psi)\right]dt\,d^3r=0 \tag{54.6}$$

となる．

この式の和の項については空間座標に関して部分積分を行なうことができ，その結果としてでてくる表面積分の項は ψ が無限で急激に減少してゆくため，あるいは有限ではあるが十分大きい箱の壁のところで周期的な境界条件にしたがうため零になる．また（54.6）の最後の項は時間に関して部分積分ができるが，（54.4）によって同様に上下

限での項はなくなる．したがって（54.6）式は

$$\int_{t_1}^{t_2}\int\left\{\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \psi}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial \psi/\partial x)}\right]-\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \dot{\psi}}\right)\right]\delta\psi\, dt\, d^3 r=0 \qquad (54.7)$$

と書ける．（54.3）は空間の各点における任意の変分 $\delta\psi$ に対して成り立っているのであるから，（54.7）は次の微分方程式と等価である：

$$\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \psi}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial \psi/\partial x)}\right]-\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \dot{\psi}}\right)=0 \qquad (54.8)$$

この方程式はラグランジアン密度 $\boldsymbol{L}(\psi, \nabla\psi, \dot{\psi}, t)$ から導かれた古典場の方程式である．

54-4　汎関数微分

粒子の力学からの類推をさらにおし進めるためには，ラグランジアン密度 $\boldsymbol{L}$ に関する方程式（54.8）を L に関する方程式に書き直す方が望ましい．すなわち粒子の力学における q_i と $\dot{q}_i$ に対応するものは，空間のすべての点における $\psi, \dot{\psi}$ の値の集合になっているから，この場合空間のある特定の点における ψ と $\dot{\psi}$ に関する L の微係数を求める必要がある．これらは通常，**汎関数微係数** *functional derivative* とよばれるが，$\partial L/\partial\psi$, $\partial L/\partial\dot{\psi}$ で書き表わすことにする．これに対する表式を求めるために，まず全空間を小さい細胞に分割して，体積積分をこれらの細胞に関する総和で置き換えることにする．さらに i 番目の空間細胞内における $\psi, \nabla\psi, \dot{\psi}$ のような量の平均値を添字 i によって表わし，この細胞の体積を $\delta\tau_i$ とすれば，

$$\sum_i \boldsymbol{L}\left[\psi_i, (\nabla\psi)_i, \dot{\psi}_i, t\right]\delta\tau_i$$

はすべての $\delta\tau_j$ が一様に0に近づく極限をとれば L に近づいてゆく．

同様にして，（54.6）あるいは（54.7）での t に関する被積分関数は

$$\sum_i\left\{\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \psi}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial \psi/\partial x)}\right]\right\}_i \delta\psi_i\,\delta\tau_i+\sum_i\left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \dot{\psi}}\right)_i \delta\dot{\psi}_i\delta\tau_i$$

で置き換えられるが，ここでは L の変分が $\psi_i, \dot{\psi}_i$ とを独立に変分して得られるような形になっている．さて，ここである特定の $\delta\psi_j$ を除いて，あらゆる $\delta\psi_i, \delta\dot{\psi}_i$ が0であるものと考えよう．L の変分は j 番目の細胞内での ψ の変分だけに由来するのであるから，δL と $\delta\psi_j$ との比をもってこの細胞内の一点での ψ の値に関する L の汎関数微係数であると考えるのは，極めて自然なゆき方である．つまり，次のように定義する．

$$\frac{\partial L}{\partial \psi}=\lim_{\delta\tau_j\to 0}\frac{\delta L}{\delta\psi_j\,\delta\tau_j}=\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \psi}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial(\partial\psi/\partial x)}\right] \tag{54.9}$$

同様にLの$\dot{\psi}$に関する汎関数微係数は，ある特定の$\delta\dot{\psi}_j$を除いてあらゆる$\delta\psi_i$と$\delta\psi_i$とが0に等しいとおいてみて次のように定義される：

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}}=\lim_{\delta\tau_i\to 0}\frac{\delta L}{\partial\dot{\psi}_j\,\delta\tau_j}=\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \dot{\psi}} \tag{54.10}$$

ここでもまた汎関数微係数を与える点$\mathbf{r}$はj番目の細胞内の一点である．最後に（54.9）と（54.10）を（54.8）に代入すると

$$\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \dot{\psi}}-\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \psi}=0 \tag{54.11}$$

が得られるが，この方程式は粒子系に対するラグランジ方程式（24.18）と非常によく似た形をもっている．

54-5 古典論のハミルトン方程式

粒子の力学の場合と同様に，ψ_jに対して正準共役な運動量はδLの$\dot{\psi}_j$の無限小変化$\delta\dot{\psi}_j$に対する比として定義することができる．もちろんこのとき，他の$\delta\dot{\psi}_i$とすべての$\delta\psi_i$とは0と考えるのである．すなわち

$$P_j=\frac{\delta L}{\delta\dot{\psi}_j}=\delta\tau_j\left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \dot{\psi}}\right)_j \tag{54.12}$$

さらに（54.11）と（54.12）によって次の関係が導かれる．

$$\dot{P}_j=\delta\tau_j\left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \dot{\psi}}\right)_j \tag{54.13}$$

次にハミルトニアンは（24.19）からの類推で

$$H=\sum_i P_i\dot{\psi}_i-L=\sum_i\left(\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \dot{\psi}}\right)_i\dot{\psi}_i\delta\tau_i-L \tag{54.14}$$

となる．これはまた，**ハミルトニアン密度** ***hamiltonian density*** $\boldsymbol{H}$の体積積分の形に書くことができる．この際細胞は十分小さくて体積積分と，これに対応する細胞の和との差は無視できるものと仮定しておく．すなわち

$$H=\int \boldsymbol{H}d^3r,\qquad \boldsymbol{H}=\pi\dot{\psi}-\boldsymbol{L},\qquad \pi\equiv\frac{\partial L}{\partial \dot{\psi}}=\frac{\partial \boldsymbol{L}}{\partial \dot{\psi}} \tag{54.15}$$

近似的なハミルトニアン（54.14）は（54.12），（54.13）の関係を一緒に考えれ

ば粒子系に対するハミルトニアンと全く同じように取扱うことができるのであるが，これを直接示すことはさけて，$\dot{\psi}$ がすでに消去されてしまって ψ と π との汎関数になっている正確な場のハミルトニアン (54.15) を取扱うことにする．すなわち古典論のハミルトンの運動方程式はこれ以上細胞による近似を用いず直接に導くことができるのである．ψ と $\dot{\psi}$ の変分によって生じる L の変分は (54.11) と (54.15) とを使って

$$\delta L=\int\left(\frac{\partial L}{\partial\psi}\delta\psi+\frac{\partial L}{\partial\dot{\psi}}\delta\dot{\psi}\right)d^3\boldsymbol{r}=\int(\dot{\pi}\delta\psi+\pi\delta\dot{\psi})d^3\boldsymbol{r}$$

$$=\int[\delta(\pi\dot{\psi})+\dot{\pi}\delta\psi-\dot{\psi}\delta\pi)d^3\boldsymbol{r}$$

$$=\delta H+\delta L+\int(\dot{\pi}\delta\psi-\dot{\psi}\delta\pi)d^3\boldsymbol{r} \qquad (54.16)$$

と書くことができる．一方これに対応する ψ と π との変分によって生じたHの変分は

$$\delta H=\int\left(\frac{\partial H}{\partial\psi}\delta\psi+\frac{\partial H}{\partial\pi}\delta\pi\right)d^3\boldsymbol{r} \qquad (54.17)$$

で表わされる．ただし，汎関数微係数についての先の議論からHの汎関数微係数は次のものになる．

$$\begin{aligned}\frac{\partial H}{\partial\psi}&=\frac{\partial\boldsymbol{H}}{\partial\psi}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\boldsymbol{H}}{\partial(\partial\psi/\partial x)}\\ \frac{\partial H}{\partial\pi}&=\frac{\partial\boldsymbol{H}}{\partial\pi}-\sum_{xyz}\frac{\partial}{\partial x}\frac{\partial\boldsymbol{H}}{\partial(\partial\pi/\partial x)}\end{aligned} \qquad (54.18)$$

ここで任意の変分 $\delta\psi$ と $\delta\pi$ とに関して (54.16) と (54.17) とを比較すると，ハミルトン形式での古典場の方程式が導かれる：

$$\dot{\psi}=\frac{\partial H}{\partial\pi},\qquad \dot{\pi}=-\frac{\partial H}{\partial\psi} \qquad (54.19)$$

ψ と π とに関する任意の汎関数Fの時間的変化の割合を与えるハミルトン方程式をここで導くことができる．そのためにFをこれに対応する汎関数密度 $\boldsymbol{F}(\psi,\pi,t)$ の体積積分として表わしておく．この際$\boldsymbol{F}$は簡単のために $\nabla\psi$ や $\nabla\pi$ を直接含まないものと仮定しておく．すると今までの議論にしたがって次のようになる．

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+\int\left(\frac{\partial\boldsymbol{F}}{\partial\psi}\dot{\psi}+\frac{\partial\boldsymbol{F}}{\partial\pi}\dot{\pi}\right)d^3\boldsymbol{r}$$

$$=\frac{\partial F}{\partial t}+\int\left(\frac{\partial F}{\partial\psi}\frac{\partial H}{\partial\pi}-\frac{\partial F}{\partial\pi}\frac{\partial H}{\partial\pi}\right)d^3\boldsymbol{r}$$

$$=\frac{\partial F}{\partial t}+\{F, H\} \tag{54.20}$$

この方程式はまた，場の変数に関する二つの汎関数の間の Poison 括弧を定義するのに利用することもできる．さらに（54.20）の右辺はFが $\nabla\psi$ や $\nabla\pi$ を含んでいる場合にも変更を要しない（問題2を見よ）．（54.20）によればHはそれが時間を直接に含まぬ場合には明らかに運動の恒量になっている．この場合Hは場の全エネルギーになる．

54-6 場に対する量子論的方程式

粒子の座標および運動量 q_i, p_i と細胞内での平均値をとった場の変数 ψ_i, P_i との対応から，場に対する量子条件としては，当然

$$[\psi_i, \psi_j]=[P_i, P_j]=0, \qquad [\psi, P_j]=i\hbar\delta_{ij} \tag{54.21}$$

をとればよいだろうと考えられる．このことはある実数値関数としての波動場を Heisenberg 流の見方でのエルミット演算子に見直したことを意味している．

ここで，細胞の体積は非常に小さいものと仮定しよう．すると(54.21)は(54.12)および（54.15）を利用して ψ と π とを用いて次のように書き直すことができる：

$$[\psi(\mathbf{r}, t), \psi(\mathbf{r}'t)]=[\pi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)]=0$$

$$[\psi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)]=i\hbar\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$$

この際，$\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ という関数は $\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ が同じ細胞内にあるときに限って $\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')=1/\delta\tau_i$ であってその他の場合には0である．また $\int f(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d^3r$ という積分が $\mathbf{r}'$ の含まれている細胞内での f の平均値を与えるという性質をもっている．したがって細胞の体積が0に近づく極限をとれば $\delta(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ は明らかに三次元の Dirac δ 関数 $\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ で置き換えることができる．そこで結局場の正準変数に対する量子条件は次のような形に与えられる：

$$\begin{aligned}&[\psi(\mathbf{r}, t), \psi(\mathbf{r}', t)]=[\pi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)]=0\\&[\psi(\mathbf{r}, t), \pi(\mathbf{r}', t)]=i\hbar\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\end{aligned} \tag{54.22}$$

任意の量子論的な力学変数 F に対する 運動方程式を求めるには，（24.10）式からか，あるいは（54.20）の Poisson 括弧を $i\hbar$ で割った交換子括弧で置き換えればよい：

$$\frac{dF}{dt}=\frac{\partial F}{\partial t}+\frac{1}{i\hbar}[F, H] \tag{54.23}$$

FとHとがψとπとによって具体的に表わされている場合には（54.22）を使って，こ

の交換子括弧を計算することができる．すなわち（54.22）と（54.23）式とは合して，ハミルトニアンHによって規定される量子化された場の運動を完全に記述しているのである．

54-7 一つ以上の成分をもつ場

これまでのところ，この節においては唯一個の実の振巾で記述されるような場だけを扱ってきたのであるが，もし場が一つ以上の成分 $\psi_1, \psi_2, \cdots$ を持っている場合には，ラグランジアン密度は $\boldsymbol{L}(\psi_1, \nabla\psi_1, \dot{\psi}_1, \psi_2, \nabla\psi_2, \dot{\psi}_2, \cdots, t)$ という形のものになる．そのときもしもこれらの成分をそれぞれ独立に変化させるものとすると，変分方程式（54.3）から各成分 $\psi_1, \psi_2, \cdots$ に対して（54.8）あるいは（54.11）の形式の方程式が導かれる．各々の ψ_s に対する正準共役な運動量は（54.15）と同様にして $\pi_s=\partial \boldsymbol{L}/\partial\dot{\psi}_s$ と定義することができる．またハミルトニアン密度は

$$\boldsymbol{H}=\sum_s \pi_s\dot{\psi}_s-\boldsymbol{L} \tag{54.24}$$

で与えられ，ハミルトン方程式は各々の s に対する（54.19）のような一対の方程式から構成される．さらに方程式（54.23）は変わらないが，交換関係（54.22）は

$$\begin{aligned}&[\psi_s(\mathbf{r},t), \psi_{s'}(\mathbf{r}',t)]=[\pi_s(\mathbf{r},t), \pi_{s'}(\mathbf{r}',t)]=0\\&[\psi_s(\mathbf{r},t), \pi_{s'}(\mathbf{r}',t)]=i\hbar\delta_{ss'}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\end{aligned} \tag{54.25}$$

で置き換えられることになる．

54-8 複　素　場

これまでのところ，取り扱ってきた場は，古典論の場合には実数値関数になり，量子論の場合には Heisenberg 流の見方でのエルミット演算子になるものであった．非相対論的な Schrödinger 方程式の場合には少し事情が異なっていて，直接問題になるのは複素関数ないしは非エルミット演算子になる単一の ψ 場である．

古典論の場合には，この ψ を実の場 ψ_1 および ψ_2 を使って

$$\psi=2^{-\frac{1}{2}}(\psi_1+i\psi_2), \qquad \psi^*=2^{-\frac{1}{2}}(\psi_1-i\psi_2) \tag{54.26}$$

のように表わすことができる．そこでまずψとψ^*とを独立に変分して得られる（54.8）の形式のラグランジ方程式はψ_1とψ_2とを独立に変分して得られる方程式と同等であることを示そう．（54.26）から導かれるように，

$$\frac{\partial}{\partial\psi}=2^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\psi_1}-i\frac{\partial}{\partial\psi_2}\right),\qquad \frac{\partial}{\partial\psi^*}=2^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{\partial}{\partial\psi_1}+i\frac{\partial}{\partial\psi_2}\right)$$

である．したがって ψ, ψ^* についての方程式は ψ_1, ψ_2 についての方程式の和と差をとることによって得られることになる．

同じようにして，ψ と ψ^* とに正準共軛な古典運動量はそれぞれ

$$\pi=2^{-\frac{1}{2}}(\pi_1-i\pi_2),\qquad \tilde{\pi}=2^{-\frac{1}{2}}(\pi_1+i\pi_2) \tag{54.27}$$

になることがわかる．第二の運動量は π^* でなく $\tilde{\pi}$ と書かれているのは，それが ψ^* に対して正準共軛になるように定義されており，必ずしも π の複素共軛である必要はないことを強調するためである．実際，次節で明らかになるように，非相対論的な Schrödinger 方程式に対して $\tilde{\pi}$ は恒等的に零になる．しかしながら，ラグランジアンが実の量である限りは，π_1 と π_2 は互いに独立であり，$\tilde{\pi}=\pi^*$ となる．この場合には $\pi_1\dot{\psi}_1+\pi_2\dot{\psi}_2=\pi\dot{\psi}+\pi^*\dot{\psi}^*$ となって，ハミルトニアンには変化はない．

これに対応する量子化された場の場合は，(54.25) で $s=1, 2$ とした交換関係から求められる．もしも π_1 と π_2 とが独立であれば，次の組以外はどの二つの変数も互いに交換可能である：

$$[\psi(\mathbf{r},t),\pi(\mathbf{r}',t)]=[\psi^\dagger(\mathbf{r},t),\quad \pi^\dagger(\mathbf{r}',t)]=i\hbar\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{54.28}$$

55□非相対論的 Schrödinger 方程式の量子化

前節で説明した場の量子化法の第一の応用例として，ここでは非相対論的 Schrödinger 方程式 (6.16) の量子化を考えてみよう．さて，この手つづきを適用するということは，いわば方程式 (6.16) をある種の物質流体の運動を記述している古典論的な運動方程式であるとして取り扱ってゆくことを意味する．後でわかるようにこれを量子化して得られる量子化された場の理論は，(16.1) あるいは (40.7) のような多粒子系の Schrödinger 方程式と同等になっている．このような理由から，この場の量子化の手続はまた，**第二量子化** *second quantization* とよばれることが多い．このよび方は，古典論的な質点力学から波動方程式 (6.16) へと移行することが，第一の量子化の手続を形成しているものと考えることを意味しているわけである．

55-1　古典論でのラグランジおよびハミルトン方程式

まず出発点としてラグランジアン密度は次のようにとっておけばよいであろう．

$$\boldsymbol{L}=i\hbar\psi^*\dot{\psi}-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^*\cdot\nabla\psi-V(\mathbf{r},t)\psi^*\psi \tag{55.1}$$

前節の終りに示されたように，ラグランジの運動方程式を導くためには，ψ と ψ^* とをそれぞれ独立に変分してやればよい．(54.8) の形式の方程式でまず ψ の変分から導かれるものは，

$$-i\hbar\dot{\psi}^*=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi^*+V(\mathbf{r},t)\psi^*$$

となり，これは (6.16) 式の複素共役になっている．次に ψ^* の変分からは (6.16) が得られる：

$$i\hbar\dot{\psi}=-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi+V(\mathbf{r},t)\psi \tag{55.2}$$

さて ψ に対し正準共役な運動量は

$$\pi=\frac{\partial\boldsymbol{L}}{\partial\dot{\psi}}=i\hbar\psi^* \tag{55.3}$$

であるが，ラグランジアン密度が $\dot{\psi}^*$ を含んでいないのであるから $\tilde{\pi}$ は恒等的に零である．したがってこの場合，(54.28) の第二の交換関係（あるいは，これに対応する古典論的 Poisson 括弧）は成立しない．したがって，$\psi^*, \tilde{\pi}$ を一対の正準共役量とみなすことはできない．しかし π^* はこの場合全然現われてこないのであるし，また，ψ^* も (55.3) によれば π によって表わすことができるのであるから，これらの量はハミルトニアンから容易に消去され，何ら不都合を生じない[1]．

すなわちハミルトニアン密度は次のようになる．

$$\boldsymbol{H}=\pi\dot{\psi}-\boldsymbol{L}=-\frac{i\hbar}{2m}\nabla\pi\cdot\nabla\psi-\frac{i}{\hbar}V\pi\psi \tag{55.4}$$

---

1)　π を ψ^* と等置することができるという結論は波動方程式 (55.2) が ψ の時間微分を一階までしか含んでいないことと関連している．すなわちこの場合 $\dot{\psi}$ は波動方程式に従って，ψ とその空間微分とによって表わすことができるのであるから，これを ψ と独立であると考えることはできないのである．しかし，もし波動方程式が時間微分に関して二階であれば，ψ と $\dot{\psi}$ とは勿論独立であって，π は ψ^* ではなく，$\dot{\psi}^*$ に関連せしめられ，さらに ψ, π および ψ^*, π はいずれも一対の正準共軛量になっているわけである．非相対論的 Schrödinger 方程式および Dirac 方程式は前者のタイプの波動方程式に属し，相対論的 Schrödinger 方程式は後者のタイプに属しているのである．

ハミルトンの運動方程式は，(54.18) を使って (54.19) から求められ，次のようになる．

$$\dot{\psi}=-\frac{i}{\hbar}V\psi+\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\psi$$

$$\dot{\pi}=\frac{i}{\hbar}V\pi-\frac{i\hbar}{2m}\nabla^2\pi$$

まず第一の方程式は (55.2) と同一であるが，第二の方程式は (55.3) と一緒にすれば (55.2) の複素共役方程式になっている．要するにこのようにして古典論的な場の理論の観点からすれば，ラグランジアン密度 (55.1) およびこれから導かれる正準変数とハミルトニアンが波動方程式 (6.16) ないしは (55.2) を正確に再現することが示されたわけである．

55-2 量子論的方程式

量子論的方程式を求めるには，(55.4) の体積積分をハミルトニアンとして，(54.23) を運動方程式として，さらに (54.28) の第一式を波動場に対する量子条件として採用することにすればよい．この場合の ψ は数関数ではなくて Heisenberg 流の見方での演算子なのであるから，ψ^* は ψ の複素共役量ではなくて，ψ にエルミット共役な演算子 $\psi^\dagger$ で置き換えれることになる．さらに，先に注意しておいたように，Heisenberg 流の見方での演算子 $\psi, \psi^\dagger$ は直接に時間を含んでいない．したがってこれらの運動方程式は，(53.23) あるいは (24.10)で右辺の第一項をはぶき左辺の $d\psi/dt$ を $\dot{\psi}$ とおいたもので与えられる．ハミルトニアンを書き表わすには π を $i\hbar\psi^\dagger$ で置き換えておくのが都合がよく，その結果は次のようになる．

$$H=\int\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^\dagger\cdot\nabla\psi+V\psi^\dagger\psi\right)d^3r \qquad (55.5)$$

(22.15) および (22.16) を使えば，この H はエルミット演算子であることがわかる．さらに，この (55.5) で与えられた量子化されたハミルトニアンは場の全エネルギーを表わす演算子になる．ただしそれを波動方程式 (6.16) によって記述されるような単一粒子に対するエネルギー演算子 (22.2) と混同しないように注意せねばならない．ここまでのところでは，新しく導入された演算子 ψ および H に対する具体的な表現はまだ何も与えられておらず，したがってこれらの演算子が一体何に作用することになるかをい

うことはできないわけである．Heisenberg の運動方程式のみを取扱う限りにおいては，ある特定の表示を選定する必要はないのであるが，本節の後段において触れることになる理論の物理的解釈に当ってはこのことは望ましいことになるのである．

さて，場の量に関する交換関係は

$$[\psi(\mathbf{r}),\psi(\mathbf{r}')]=[\psi^\dagger(\mathbf{r}),\psi^\dagger(\mathbf{r}')]=0$$
$$[\psi(\mathbf{r}),\psi^\dagger(\mathbf{r}')]=\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') \tag{55.6}$$

ここで場の量の引数のうち，時間変数 t を省いてあるのは，交換子の中に表われてくる二つの場が双方とも，同一の時刻に関するものであることを示している．以上の議論にしたがって，ψ に対する運動方程式は次のようになる．

$$\begin{aligned}i\hbar\dot{\psi}&=[\psi,H]\\&=\left[\psi,\int\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'\psi^{\dagger\prime}\cdot\nabla'\psi'd^3r'\right]+\left[\psi,\int V'\psi^{\dagger\prime}\psi'd^3r'\right]\end{aligned} \tag{55.7}$$

ここで，ダッシュは積分変数を $\mathbf{r}$ から $\mathbf{r}'$ に置き換えてあることを示している．ここでまず右辺の第二項は，(55.6) を使って，容易に計算することができて，すなわち

$$\begin{aligned}\int V'(\psi\psi^{\dagger\prime}\psi'-\psi^{\dagger\prime}\psi'\psi)d^3r'&=\int V'(\psi\psi^{\dagger\prime}-\psi^{\dagger\prime}\psi)\psi'd^3r'\\&=\int V'\psi'\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d^3r'=V\psi\end{aligned} \tag{55.8}$$

となる．ただし，ψ は数関数である V と可換なのである．次に右辺の第一項に関してはまず $\int\nabla\psi^{\dagger\prime}\cdot\nabla\psi'd^3r'$ に対して部分積分を適用し，これを $-\int\psi^{\dagger\prime}\nabla'^2\psi'd^3r'$ と変換して置けば，計算が簡単になる．この際，表面積分の項は，ψ が無限遠において零となるか，あるいは周期的境界条件にしたがうために零になる．したがって，

$$\begin{aligned}\left[\psi,\int\nabla'\psi^{\dagger\prime}\cdot\nabla'\psi'd^3r'\right]&=-\left[\psi,\int\psi^{\dagger\prime}\nabla'^2\psi'd^3r'\right]\\&=-\int[\psi,\psi^{\dagger\prime}]\nabla'^2\psi'd^3r'=-\int(\nabla'^2\psi')\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d^3r'=-\nabla^2\psi\end{aligned} \tag{55.9}$$

となる．そこで，(55.8) および (55.9) を (55.7) に代入すれば，(55.2) が得られる．すなわち古典場の理論および量子場の理論とから導かれる運動方程式は明らかに一致しているわけである．さらにこれと全く同様に計算をすすめればわかるように，方程式 $i\hbar\dot{\psi}^\dagger=[\psi^\dagger,H]$ からは，(55.2) のエルミット共役方程式が導かれる；このことはまた，Hがエルミット演算子である限り，上の方程式が $i\hbar\dot{\psi}=[\psi,H]$ のエルミット共役になっていることに注意すれば，直接証明される事柄でもある．

もし V が時間 t に無関係であれば，H は時間を直接含まないことになるから (54.23) にしたがって運動の恒量になっている．すなわち場のエネルギーは一定である．次に，これと並んでもう一つの興味ある演算子は

$$N=\int \psi^\dagger \psi \, d^3r$$

である．これは場の粒子の総数を表わす演算子であると仮定する．まず，すぐに気がつくように，N はエルミット演算子である．次にこの演算子の時間微分は次式で与えられる．

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{N} &= [N, H] \\ &= \left[\int \psi^\dagger \psi \, d^3r, \int\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla'\psi^{\dagger\prime}\cdot\nabla'\psi' + V'\psi^{\dagger\prime}\psi'\right)d^3r'\right] \end{aligned} \tag{55.10}$$

ここでまず，N と H のうちで V を含む部分との交換子は

$$\iint V'(\psi^\dagger\psi\psi^{\dagger\prime}\psi' - \psi^{\dagger\prime}\psi'\psi^\dagger\psi)\, d^3r\, d^3r'$$

と書くことができるが，この括弧内の演算子は (55.6) を使って

$$\begin{aligned} \psi^\dagger\psi\psi^{\dagger\prime}\psi' - \psi^{\dagger\prime}\psi'\psi^\dagger\psi &= \psi^\dagger[\psi^{\dagger\prime}\psi + \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]\psi' - \psi^{\dagger\prime}\psi'\psi^\dagger\psi \\ &= \psi^{\dagger\prime}\psi^\dagger\psi'\psi + \psi^\dagger\psi'\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \psi^{\dagger\prime}\psi'\psi^\dagger\psi \\ &= \psi^{\dagger\prime}[\psi'\psi^\dagger - \delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]\psi + \psi^\dagger\psi'\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}') - \psi^{\dagger\prime}\psi'\psi^\dagger\psi \\ &= 0 \end{aligned}$$

と変形することができる．この最後の変形は δ 関数が $\mathbf{r}=\mathbf{r}'$ でなければ零になるからである．同様に計算を進めれば，少し複雑にはなるけれども

$$[\psi^\dagger\psi, \nabla'\psi^{\dagger\prime}\cdot\nabla'\psi'] = [\psi^\dagger\nabla'\psi' - (\nabla'\psi^{\dagger\prime})\psi]\cdot\nabla'\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

を示すことができるが，この表式の $\mathbf{r}$ と $\mathbf{r}'$ に関する二重積分は零になる．結局 (55.10) から N が運動の恒量であることが証明される．

また同様にして (55.6) の交換子が運動の恒量であること，したがってこれらの交換関係がある特定の時刻において成立しておれば，時刻の如何を問わず，これが常に成立することが証明される．

55-3 N 表示

さてここで演算子 N を対角線的にするような表示に話を限定しよう．まず N はエルミッ

ト演算子であるから，その固有値は実数である．この表示を規定する便利でかつ一般的なやり方はある完全な規格直交関数系 $u_k(\mathbf{r})$ を使った（54.1）のような展開を利用することである．ただし，議論をはっきりさせるために $u_k(\mathbf{r})$ は離散的であると仮定しておく．つまり，次のような一般的方法を採用するのが便利である．まず演算子 ψ を（54.1）のごとく完全直交関数系 $u_k(\mathbf{r})$ に関して展開して

$$\psi(\mathbf{r},t)=\sum_k a_k(t)u_k(\mathbf{r}),\qquad \psi^\dagger(\mathbf{r},t)=\sum_k a_k{}^\dagger(t)u_k{}^*(\mathbf{r}) \tag{55.11}$$

とおく．$u_k(\mathbf{r})$ は空間座標に関する数値関数であるが，a_k は時間を含む Heisenberg 流の見方での演算子である．ところで（55.11）は a_k について逆に解くことができて，

$$a_k(t)=\int u_k{}^*(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r},t)d^3r,\qquad a_k{}^\dagger(t)=\int u_k(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r},t)d^3r$$

となる．ところで（55.6）式の最後の交換関係の両辺に $u_k{}^*(\mathbf{r})\,u_l(\mathbf{r}')$ をかけ，$\mathbf{r}$ および $\mathbf{r}'$ に関して積分を遂行すれば，u_k の直交性の結果として

$$[a_k(t),a_l{}^\dagger(t)]=\iint u_k{}^*(\mathbf{r})u_l(\mathbf{r}')\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d^3r\,d^3r'=\delta_{kl} \tag{55.12}$$

という交換関係が導かれる．同様にすれば，任意の k,l に対して，a_k と a_l および $a_k{}^\dagger$ と $a_l{}^\dagger$ がそれぞれ可換であることもまた明らかである．次にNの表式に（55.11）を代入すればわかるように，

$$N=\sum_k N_k\qquad ただし\quad N_k=a_k{}^\dagger a_k \tag{55.13}$$

となる．N_k 同志はすべて互いに交換可能であることは容易にわかる．したがってこれらは同時に対角化してやることができる．

55-4 生成，消滅および個数の演算子

演算子 a_k および $a_k{}^\dagger$ に対する交換関係（55.12）は，すでに §25 において調和振動子との関連で解かれたものである．その個所で明らかにされたように，$a^\dagger a$ が対角型になっている表示での（25.10）の解は，（25.12）の行列になっている．したがって，N_k のそれぞれが対角型になっている表示では，量子化された場の状態はケット

$$|n_1,n_2,\cdots n_k,\cdots\rangle \tag{55.14}$$

になることが結論される．ただし，n_k は N_k の固有値で正整数または零でなければな

らない．さらに，次の関係が成立する．

$$a_k|n_1,\cdots n_k,\cdots\rangle = n_k^{\frac{1}{2}}|n_1,\cdots n_k-1,\cdots\rangle$$
$$a_k^\dagger|n_1,\cdots n_k,\cdots\rangle = (n_k+1)^{\frac{1}{2}}|n_1,\cdots n_k+1,\cdots\rangle \tag{55.15}$$

したがって，$a_k^\dagger$ および a_k は場の状態 k に対する**生成**および**消滅の演算子** ***creation* and *destruction operator*** とよばれる．

(55.10) から明らかなように $N=\sum_k N_k$ は定数になっているが，**個数演算子** ***number operator*** N_k は運動の恒量になっている必要はない．N_k の変化の割合は

$$i\hbar\dot{N}_k = [a_k^\dagger a_k, H]$$

で与えられる．ただし，Hは (55.5) と (55.11) から求められる：すなわち

$$H = \sum_{jl} a_j^\dagger a_l \int\left(\frac{\hbar^2}{2m}\nabla u_j^* \cdot \nabla u_l + V u_j^* u_l\right) d^3r$$
$$= \sum_{jl} a_j^\dagger a_l \int u_j^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V\right) u_l d^3r \tag{55.16}$$

(55.16) の体積積分が，j あるいは l のどちらか一つが k に等しいときにすべて零になっている場合，かつその場合に限ってある特定の N_k が一定になることを (55.12) から証明することは難しいことではない．これらの積分は1粒子ハミルトニアン (23.2) の行列要素に他ならないから，N_k が運動の恒量であるための必要かつ十分条件は，状態 k の関係するような非対角線要素のすべてが零になることであるということになる[1]．

u_k が (23.2) の固有値 E_k をもつ固有関数になっている場合は特に興味がある．この場合，(55.16) の積分は $E_k\delta_{jl}$ となり，場のハミルトニアンは

$$H = \sum_k a_k^\dagger a_k E_k = \sum_k N_k E_k \tag{55.17}$$

となる．この特別のN表示ではHもまた対角型になっているわけである；なお，ケット $|n_1,\cdots n_k,\cdots\rangle$ は全エネルギー演算子Hに対し固有値 $\sum n_k E_k$ をもっている．この場合には，すべての N_k が一定になっていることは明らかである．

55-5 多粒子系の Schrödinger 方程式との関連性

さて以上にのべてきた量子化された場の理論というものは，§40 において論じられた．

---

1) 量子化された場に対するこの結果は，(35.5) 式に含まれている1粒子の確率振幅についての対応する結果と密接に関連している

多粒子系の Schrödinger 方程式との間に密接な関連性をもっている．つまり，u_k が単一粒子のハミルトニアン（23.2）に対する固有関数になっておれば，場の理論としては次のように結論されるのである．すなわち，k 番目の状態にある粒子の個数が一定の正整数または零でそのエネルギーが $\sum n_k E_k$ であるような定常解が存在し，この種の解はそれぞれ一つのケット $|n_1, \cdots, n_k, \cdots\cdot\rangle$ で記述される；これらのケットは完全規格直交系をつくっており，個数の組 $n_1, \cdots$ のそれぞれに対してちょうど1個の解が存在する．一方（40.1）の ψ のような多粒子系に対する定常波動関数について言えば，もし粒子間に相互作用の無い場合には，これは単一粒子の波動関数 $u_k(\mathbf{r})e^{-iE_k t/\hbar}$ の積として表わすことができる．さらに，これらの積の一次結合をとって，任意の一対の粒子の座標の交換に対して，対称的であるように作っておけば，これは各状態に配分される粒子数を指定することによって一意的に規定される．また，各状態にある粒子数は零または正の整数であって，エネルギーは，各粒子エネルギーの総和として与えられる．

したがってこれまでのところで説明してきた量子化された場の理論というものが，互いに相互作用をおよぼし合わないような幾つかの粒子を記述する Schrödinger 方程式で，その対称解のみを問題にする場合と同等であることがわかる．このようにして，Einstein-Bose 統計にしたがう粒子を記述する理論へ自動的に導かれてきたわけである．ちなみに，たとえ粒子間の相互作用を考慮に入れた場合にあっても，上記の二つの理論が完全に同等であることを証明することができる[1]．

さて，この量子化された場の理論形式に対して，何らかのやり方で修正を加えることによって Fermi-Dirac 統計にしたがう粒子の理論を導くことができるものかどうかを検討することは自然ななりゆきである．すでに §40 において論じたように，この種の粒子の集団を記述するには，粒子座標の任意の一対の交換に関して，反対称であるような，多粒子系の波動関数を用いればよい．ところでこの場合に必要になる1粒子波動関数の積の一次結合も各状態にある粒子の個数を指定することによって，一意的に規定することができる．ただし，この場合，これらの粒子数は統計の性質にしたがって0か1であることに注意せねばならない．したがって，この場合に対して望まれる上述の理論の修正は当然，演算子 N_k の固有値をそれぞれ0または1に局限することによって

1) Heisenberg, "The Physical Principles of the Quantum Theory," (University of Chicago Press, Chicago, 1930)［邦訳，前出］の付録の §11 を見よ．

達成するものでなければならない．

55-6 反交換関係

さて上述の理論構成を振り返ってみればわかるように，各 N_k の固有値を零あるいは正整数とする結論は，a_k と $a_k{}^\dagger$ に対する交換関係（55.12）に由来している．一方，この（55.12）は ψ および $\psi^\dagger$ に対する交換関係（55.6）から生じている．したがって排他原理にしたがう粒子の理論を構成しようというのであれば，当然，（55.6）を修正してかからねばならない．しかし，このような修正が，ハミルトニアンを（55.5）の形をもつとき，ψ に対する量子論的運動方程式は，波動方程式（55.2）の形になるようになされるものであることを要請しておくのが妥当であろう．

さて，Jordan および Wigner[1] は，このような修正が（54.22）および（55.6）における交換子括弧

$$[A, B] \equiv AB - BA$$

を反交換子括弧

$$[A, B]_+ \equiv AB + BA$$

によって置き換えることによって達成されることを見出した．すなわち（55.6）の交換関係は

$$\begin{aligned}
&[\psi(\mathbf{r}), \psi(\mathbf{r}')]_+ = \psi(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}') + \psi(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) = 0 \\
&[\psi^\dagger(\mathbf{r}), \psi^\dagger(\mathbf{r}')]_+ = \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}') + \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}) = 0 \\
&[\psi(\mathbf{r}), \psi^\dagger(\mathbf{r}')]_+ = \psi(\mathbf{r})\psi^\dagger(\mathbf{r}') + \psi^\dagger(\mathbf{r}')\psi(\mathbf{r}) = \delta^3(\mathbf{r} - \mathbf{r}')
\end{aligned} \tag{55.18}$$

によって置き換えられるというわけである．そうすれば，（55.11）と（55.18）から直接次の関係が導かれる．

$$\begin{aligned}
&[a_k, a_l]_+ = a_k a_l + a_l a_k = 0 \\
&[a_k{}^\dagger, a_l{}^\dagger]_+ = a_k{}^\dagger a_l{}^\dagger + a_l{}^\dagger a_k{}^\dagger = 0 \\
&[a_k, a_l{}^\dagger]_+ = a_k a_l{}^\dagger + a_l{}^\dagger a_k = \delta_{kl}
\end{aligned} \tag{55.19}$$

ところで個数演算子を前の場合と同様に $N_k = a_k{}^\dagger a_k$ と定義すると，まず気がつくことはこれらは互いに交換可能であって，すべてを同時に対角線化することができるということである．次に，N_k の固有値は（55.19）を利用してつくった次の行列方程

1) P. Jordan and E. Wigner, *Z. Physik* **47**, 631 (1928).

式から求めることができる．

$$N_k^2=a_k^\dagger a_k a_k^\dagger a_k=a_k^\dagger(1-a_k^\dagger a_k)a_k=a_k^\dagger a_k=N_k \qquad (55.20)$$

もしも N_k が対角型になっていて，固有値 $n'_k, n''_k\cdots$ をもつとすれば，N_k^2 もまた，対角型になっていて，固有値は $n'^2_k, n''^2_k, \cdots$ をもつことは明らかである．結局，上の行列方程式は固有値に対する代数方程式

$$n'^2_k=n'_k, \qquad n''^2_k=n''_k, \cdots$$

と同等である．これらは，それぞれ二次方程式であって，二つの根，0および1をもっている．したがって N_k の固有値は0および1になり，すなわち粒子は，排他原理にしたがうことになる．さらに粒子の総数 $N=\sum N_k$ の固有値は，前と同様零あるいは正の整数である．またハミルトニアンに対する表式（55.16）および（55.17）は前と同様であって，エネルギーの固有値は $\sum n_k E_k$ になっている．

55-7 運動方程式

ハミルトニアンが（55.5）によって与えられる場合に，演算子 ψ に対する量子論的運動方程式を求めるには，まず第一にこの場合にも一般的な運動方程式（54.23）がそのまま生かされるべきものかどうかということを決定しておかねばならない．ところで，この一般的な方程式というものは古典論的方程式（54.20）において，その Poisson 括弧を交換子括弧によって置き換えることによって導かれたものである．このような手続きを正当化する根拠は，§24 の粒子の理論からの類推，(24.27) に与えられている2種類の括弧記号の代数的性質の同一性，さらには第VI章問題9の対応論的議論といったことである．したがって，もし方程式（54.23）を放棄するとすれば，これはまた同様に古典論的方程式（54.20）が放棄されることを意味するものと考えねばならない．しかし，ここで取扱われている量の多くは（粒子数，エネルギー等々）十分明確な意味を有する古典論的対応概念をもっているのであるから，この際一般的な量子論的運動方程式として，(54.23) を生かしておくことにしたい．

そうすれば，ψ に対する運動方程式は（55.7）で与えられることになる．ただしこの右辺を計算するには，この場合には反交換関係（55.18）を使用しなければならない．その結果（55.8）は次式によって置き換えられることになる．

$$\int V'(\psi\psi^{\dagger\prime}\psi'-\psi^{\dagger\prime}\psi'\psi)d^3r'=\int V'(\psi\psi^{\dagger\prime}+\psi^{\dagger\prime}\psi)\psi' d^3r'$$

$$=\int V'\psi'\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')d^3r'=V\psi$$

(55.7) の右辺第一項について同様な取扱を行なっても，その結果 (55.9) の右辺には何ら変化が生じない．すなわち，波動方程式 (55.2) の形は，波動場の振幅間の交換関係を反交換関係で置き換えても何ら影響をうけないのである．さらに演算子Nおよび，(55.18) の反交換子括弧が運動の恒量になっていることもまた，容易に示すことができる．

55-8 反交換関係の物理的内容

反交換子括弧は，Poisson 括弧が示すような代数的性質をもっていないから，交換関係 (55.18) および (55.19) にしたがうような演算子 ψ および a_k に対しては，その古典論的対応が存在しないものと結論することができる．しかしこのことは何もNおよびHという量までが，その古典論的極限をもっていないことを意味するものではない．というのは，これらはそれぞれ，ψ および a_k の双一次結合からなっていて互いに可換であるからである．

さてこれらの結論を確認するためには，次のように物理的観点に立って考察を進めればよい．すなわち場の振幅が古典論的な測定によって検出できるほど十分強いものであるためには，場が干渉可能なものでありうる程度に，極めて多数の粒子が同一の状態を占めることが可能になっていなければならない．これはとりもなおさずこの粒子が Einstein-Bose 統計にしたがうべきことを示している．たとえば，強い電磁場をつくることができ，それらが古典論の意味で測定可能であることが知られている以上，光の量子すなわち光子は Einstein-Bose の統計にしたがうものと結論してよいことになる．Fermi-Dirac 統計にしたがう金属電子の場合に，エネルギーあるいは電荷密度，電流密度等の量は，前述のごとく場の振幅の双一次結合として構成されているのであるから，当然，古典論的に測定可能である．しかし電子場の振幅自体というものは，古典論的には測定できない量なのである[1]．

55-9 反可換演算子 a_k に対する表示

(55.19) に表われているような演算子の具体的な表示を求めるには，まず手はじめとし

て，系のとり得る状態が唯一つに限られるという仮想的かつ教訓的な場合をとりあげるのが考えやすい．この場合の解かるべき行列方程式は

$$a^2=a^{\dagger 2}=0,\qquad aa^\dagger+a^\dagger a=1,\qquad N=a^\dagger a \tag{55.21}$$

となる．(55.21) は，第VI章の問題4においてすでに解かれているものに他ならない．先に (55.20) で示しておいた通り $N^2=N$ であり，したがって，Nの固有値は0および1である．縮退が存在しないものとすればNは対角線マトリックス

$$N=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix} \tag{55.22}$$

によって表わすことができる．次に注目すべきことはNは，零以外の固有値をもっているのであるから，行列aを同時に対角線化してやることはできないということである．というのは，もしそれが可能であるものと仮定すれば，(55.21) の第一式にしたがって，aの二つの固有値の平方は両方とも0になるはずである．このことはa，したがってまた$a^\dagger$およびNが恒等的に零であること；いかなる表示をとってみてもNが (55.22) のような形をとり得ないことを意味することになるからである．

さて (55.21) および (55.22) の二条件に合致するようなaおよび$a^\dagger$は

$$a=\begin{bmatrix}0 & 1\\ 0 & 0\end{bmatrix},\qquad a^\dagger=\begin{bmatrix}0 & 0\\ 1 & 0\end{bmatrix} \tag{55.23}$$

となる．さらに，この系の取り得る二つの状態を表わすケットは

$$|0\rangle=\begin{bmatrix}1\\ 0\end{bmatrix},\qquad |1\rangle=\begin{bmatrix}0\\ 1\end{bmatrix} \tag{55.24}$$

と表わすことができる．(55.24) のうち前者が (55.22) の演算子Nの固有値0に対応し，後者が固有値1に対応することは容易に示される．したがって (55.23) および (55.24) からは次の関係が容易に求められる：

$$a|n\rangle=n|1-n\rangle,\qquad a^\dagger|n\rangle=(1-n)|1-n\rangle \tag{55.25}$$

つまり，この場合にもやはりaおよび$a^\dagger$はそれぞれ，生成演算子および消滅演算子の

---

1)　(前頁) ある荷電粒子 (Einstein-Bose 統計あるいは Fermi-Dirac 統計に従う) の場の振幅が，古典論的に測定可能であるというのであれば，この際，場のエネルギーは，ψの双一次結合のみならず，また，ψそれ自身にも依存すべきはずであって，ψがHの中に一次で現われてくるということになる．さてこの場合には，当然ハミルトニアンの中にa_kあるいは$a_k{}^\dagger$に関して一次の項が現われてくるのであるが，これはとりもなおさず現象面において，一個の荷電粒子が，生成消滅するような過程の存在することを示している．したがって，荷電が保存されるように理論が構成されている場合には，ψを古典論的に測定することはできないということが結論されるのである．

役割を果しているのである.

実際の問題では，系のとりうる状態の数は無限個存在しており，(55.23) のように，いちいち具体的に行列の形を書いてゆくのは不便である．しかし，この場合にも，まず演算子 N_k の（0か1かの）固有値 n_k で指定されるケット $|n_1, \cdots, n_k, \cdots\rangle$ に対して演算子 a_k および $a_k{}^\dagger$ を作用させて得られる結果を，抽象的な形に書き表わすことができる．さて，ここで求められている関係式はおそらく (55.25) のような形をとることになるはずではあるが，その際（添字 k を書き加えた）この種の関係式の系列が (55.19) の最初の二式の要請と不一致をきたすことのないようにしなければならない.

そこで次のように議論を進めてゆくことにする．まず系のとりうる状態 k を任意の，しかも確定した方法で，$1, 2, \cdots, k, \cdots$ と順序づけておくことにする．すると a_k あるいは $a_k{}^\dagger$ のそれぞれを作用させた結果は，一応 (55.25) のような形に書き表わされるのであるが，この際修正を要する唯一の点というのは，上に考えた順序づけの中で着目している k 番目の状態に先だつような状態のうちで，すでに占有されている状態が偶数個あるか，奇数個あるかにしたがってこの式に正あるいは負の符号を付け加えることである．つまり，(55.15) の Einstein-Bose 方程式を次のように排他原理を加味した方程式に置き換えるわけである.

$$
\begin{aligned}
&a_k|n_1, \cdots n_k, \cdots\rangle = \theta_k n_k|n_1, \cdots, 1-n_k, \cdots\rangle \\
&a_k{}^\dagger|n_1, \cdots n_k, \cdots\rangle = \theta_k(1-n_k)|n_1, \cdots, 1-n_k, \cdots\rangle \qquad (55.26) \\
&\theta_k = (-1)^{\nu_k} \qquad \nu_k = \sum_{j=1}^{k-1} n_j
\end{aligned}
$$

1例として，あるケットに $a_k a_l$ と $a_l a_k$ とを作用させたときの効果を計算しよう．ただし，議論をはっきりさせるために，$l>k$ になっているような順序づけを考えておくことにする．a_k および a_l のそれぞれを作用させた結果が零ということにはならないものとすれば，元のケットにおける n_k, n_l はいづれも1に等しいはづである．そこで $a_k a_l$ を作用させれば，まず l 番目の状態がからになり，ついで k 番目の状態がからになって，この際，$\theta_l\theta_k$ という因子が導入される．次に，$a_l a_k$ を作用させればまず k 番目の状態がからになって，θ_k という因子が導入されることには変りはない．しかしさらに a_l を作用させると，この際 k 番目の状態がすでにからになっているため l 番目より手前の状態にある粒子の数は，前の場合より1個だけ少ないのであるから θ_l の

符号は逆転する．このようにして，

$$a_k a_l|\cdots n_k\cdots n_l\cdots\rangle=-a_l a_k|\cdots n_k\cdots n_l\cdots\rangle$$

となることがわかる．これは(55.19)の第一式と合致している．全く同様にして(55.26)が(55.19)の残りの二式をケットに作用させた結果と一致することが示される．さてこのようなケットの集合は，この多粒子系のとりうるすべての可能な状態を表わしているのであるから，これらは完全系を形成しており，(55.26)式から演算子方程式として(55.19)が導かれることになるのである．

56□真空中の電磁場[1)]

ここで §54 で展開した方法を真空中の電磁場の量子化に適用しよう．理論のローレンツ不変性をはっきりさせることは問題にしない以上，四次元的な記法よりもむしろ三次元的な記法を一貫して使用することにする．まず Maxwell 方程式がその変分によって与えられるようなラグランジアンを求める．これから運動量を定義し，ハミルトニアンを設定することができる．さらに古典論の Poission 括弧を交換子括弧で置き換えることによって量子化が実行される．場の変数間の交換関係として反交換関係が存在する可能性もあるが，強い電磁場は古典論的に測定可能なものであり，その意味で光子は Einstein-Bose の統計にしたがうことが実験からわかっている以上，ここでは反交換関係の可能性は考えないことにする．

56-1　ラグランジ方程式

空虚な空間中での Maxwell 方程式は (44.2) の方程式で ρ および $\mathbf{J}$ を零とおけば得られる：

$$\begin{gathered}\nabla\times\mathbf{E}+\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{H}}{\partial t}=0,\qquad \nabla\times\mathbf{H}-\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{E}}{\partial t}=0\\ \nabla\cdot\mathbf{E}=0,\qquad \nabla\cdot\mathbf{H}=0\end{gathered}\tag{56.1}$$

1)　この節および次の節の素材についてのより立ち入った議論については，566頁の脚注 1) であげた文献ならびに次のものを見よ．E. Fermi, *Rev. Mod. Phys.*, **4**, 87 (1932)；L. Rosenfeld, *Ann. Inst. Henri Poincare*, **1**, 25 (1931)；W. Heitler, "The Quantum Theory of Radiation" 第3版 (Oxford, New York. 1954) [邦訳：前出].

ラグランジアンを書き表わすには，ポテンシャル $\mathbf{A}, \phi$ を使うのが一番便利である．ポテンシャルの一応の定義としては次の関係がある．

$$\mathbf{E}=-\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}-\nabla\phi, \qquad \mathbf{H}=\nabla\times\mathbf{A} \tag{56.2}$$

§44 で論じたように，この定義ではポテンシャルは完全にはきまらない．つまり (56.2) から計算される電場および磁場の強さは変えないとしても，なおポテンシャルにゲージ変換を行なう可能性が残っているわけである．

ラグランジアン密度としては次のようにとることができる．

$$L=\frac{1}{8\pi}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}+\nabla\phi\right)^2-\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2 \tag{56.3}$$

ここで A_x, A_y, A_z および ϕ を場の変数とみなせば，(54.8) を使ってラグランジアン方程式を求めることができる．$\mathbf{A}$ の各成分の変分の結果得られる三つの方程式は一括して次のように書くことができる．

$$-\frac{1}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}-\frac{1}{4\pi c}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}+\nabla\phi\right)=0$$

これは (56.1) の方程式の第二のものと同一である．ϕ についての変分からは

$$-\frac{1}{4\pi}\nabla\cdot\left(\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}+\nabla\phi\right)=0$$

が得られ，これは (56.1) の第三の方程式と同一になっている．Maxwell 方程式の残りの二つの方程式は (56.2) のポテンシャルの定義の式によって自動的に満たされている．

56-2 ハミルトン方程式

A_x に正準共役な運動量は (54.15) および (56.3) から求められて次のようになる．

$$P_x=\frac{1}{4\pi c}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial A_x}{\partial t}+\frac{\partial \phi}{\partial x}\right) \tag{56.4}$$

他の二つの運動量に対しても同様な表式が得られる．ラグランジアン密度には $\dot{\phi}$ があらわれていないから，ϕ に正準共役な運動量は恒等的に零になる．非相対論的な Schrödinger 方程式 (§55) の場合にも ψ^* に関して同様の事情がおこったわけである；前の場合同様この事情は ϕ を場の変数として取り扱うことは不可能で，ハミルトニアンから ϕ を消去しなければならないということを意味している．

ハミルトニアン密度は (54.24) から求められて

$$\boldsymbol{H}=\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}-L=2\pi c^2\mathbf{P}^2+\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2-c\mathbf{P}\cdot\nabla\phi \tag{56.5}$$

となる．ただし，ここでは (56.4) を利用して $\partial\mathbf{A}/\partial t$ を $\mathbf{P}$ を含む項で置き換えてある．ハミルトンの運動方程式 (54.19) は

$$\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}=4\pi c^2\mathbf{P}-c\nabla\phi,\qquad \frac{\partial\mathbf{P}}{\partial t}=-\frac{1}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\mathbf{A} \tag{56.6}$$

となる．これらの方程式の中の第一のものは実は (56.4) と同一である；このように (56.4) がもう一度繰り返し導かれてくることは，理論のハミルトニアン形式が (56.5) と正準変数 $\mathbf{A}$ および $\mathbf{P}$ だけで構成されている以上必要なことなのである．ところでこの方程式を使って $-4\pi c\mathbf{P}$ に等しいものとして E なる量を定義することができる．そうすれば (56.6) の第二の方程式は (56.1) の Maxwell 方程式の第二のものに一致する．ただし，ここでまた H なる量を $\nabla\times\mathbf{A}$ に等しいものとして定義しておくことにする．(56.1) の第一および第四の方程式は E および H の定義の仕方から自動的に満たされていることがわかる．

Maxwell 方程式の中の第三のものを (56.5) を基にしたハミルトン方程式の一つとして導くことはできない．しかし，これに対して次のように考えることができる．つまり，ハミルトン方程式の解の中であるきまった時刻で $\nabla\cdot\mathsf{E}=0$，または $\nabla\cdot\mathbf{P}=0$ が成立している解だけを扱うことにする．そうしておいて，もしもこの制限があらゆる時刻を通じて保たれてゆくならば，このように選んだ解が矛盾を含まない完全な組になっているわけである．$\nabla\cdot\mathbf{P}$ の時間についての微係数は (56.6) の第二式から求められて，次のようになる．

$$\frac{\partial}{\partial t}\nabla\cdot\mathbf{P}=-\frac{1}{4\pi}\nabla\cdot\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}=0$$

場の方程式は時間微分について一階であるから，ある瞬間に $\nabla\cdot\mathsf{E}=0$ という制限条件をつけることはあらゆる時刻に (56.1) の第三式が成り立っていることと同等であることが示されたわけである．

次にハミルトニアン密度 (56.5) の最後の項は場のハミルトニアンには寄与しないことが示される．つまりこの項の体積積分は部分積分を使えば $c\int\phi\nabla\cdot\mathbf{P}d^3r$ と変形されるが，これは零に等しい；一方積分領域の表面での値による項は $\mathbf{P}$ が無限遠で十分

速く零になるためか，あるいは大きな箱の壁の上で周期的な境界条件にしたがっているためかいずれにしても零になる．結局，場のハミルトニアンは

$$H=\int\left[2\pi c^2\mathbf{P}^2+\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2\right]d^3r \tag{56.7}$$

となり，ϕ はあらわれない．この表式は電磁場に含まれる全エネルギーに対する普通よく使われる表式 $(1/8\pi)\int(\mathbf{E}^2+\mathbf{H}^2)d^3r$ と一致している．

56-3 量子論的方程式

古典論での電磁場を量子論的な場に転換するには次のような道筋をとればよい．まず (56.7) のハミルトニアンと場の正準変数 $\mathbf{A}, \mathbf{P}$ から出発する．ϕ はもは早やあらわれていないから $\phi=0$ になるようにゲージを選んでおくのが便利である．一般的な運動方程式は (54.23) で，場の変数の間の交換関係 (54.25) は次のようになる．

$$\begin{aligned}&[A_s(\mathbf{r},t),\ A_{s'}(\mathbf{r}',t)]=[P_s(\mathbf{r},t),\ P_{s'}(\mathbf{r}',t)]=0\\&[A_s(\mathbf{r},t),\ P_{s'}(\mathbf{r}',t)]=i\hbar\delta_{ss'}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\end{aligned} \tag{56.8}$$

ただし添字 s, s' の各々は x, y, z のどれかをとりうるとする．

$\mathbf{A}$ の一つの代表的な成分に対する運動方程式は次のようになる．

$$i\hbar\dot{A}_x(\mathbf{r},t)=[A_x(\mathbf{r},t),H]$$

A_x は H の中の $(\nabla\times\mathbf{A})^2$ の項とは可換であり，また $\mathbf{P}^2$ の中で $P_y{}^2+P_z{}^2$ を含む部分とも可換である；結局 A_x と H の中の $P_x{}^2$ の項との交換関係を計算しさえすればよいわけである．要するに $[A_x(\mathbf{r},t),H]$ としては $[A_x, P'_x{}^2]$ の $\mathbf{r}'$ についての積分の $2\pi c^2$ 倍になる．ただしダッシュは引数が $\mathbf{r}$ でなく $\mathbf{r}'$ になっていることを示すものである．

$$\begin{aligned}[A_x(\mathbf{r},t),\ P_x{}^2(\mathbf{r}',t)]&=A_xP'_x{}^2-P'_x{}^2A_x\\&=[P'_xA_x+i\hbar\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]P'_x-P'_x{}^2A_x\\&=P'_x[P'_xA_x+i\hbar\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]+i\hbar\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')P'_x-P'_x{}^2A_x\\&=2i\hbar\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')P'_x(\mathbf{r}',t)\end{aligned}$$

$\mathbf{r}'$ についての積分を行なうと次の関係が得られる．

$$\begin{aligned}i\hbar\dot{A}_x(\mathbf{r},t)&=2\pi c^2\int 2i\hbar\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')P_x(\mathbf{r}',t)d^3r'\\&=4\pi c^2 i\hbar P_x(\mathbf{r},t)\end{aligned} \tag{56.9}$$

この関係に対応する古典論の方程式は $\phi=0$ とおいた (56.6) の第一式であるが，それ

と同一になっている.

P の代表的な一つの成分に対する運動方程式は

$$i\hbar\dot{P}_x(\mathbf{r},t)=[P_x(\mathbf{r},t),H]$$

となる. P_x はHの被積分関数の中で $\nabla\times\mathbf{A}$ のyおよびz成分の2乗の和を含む部分以外の項とすべての可換である. この交換子括弧の計算は面倒ではあるが真正直にやればよく（問題10を見よ), その結果得られる $\dot{\mathbf{P}}$ に対する表式は（56.6）の第二式と一致する. 要するに, $\mathsf{E}=-4\pi c\mathbf{P}$ および $\mathsf{H}=\nabla\times\mathbf{A}$ という定義をとれば, **A** および **P** に対する量子論的な運動方程式は（56.1）の Maxwell 方程式の第一, 第二および第四式と一致している.

Maxwell 方程式の第三式は, 一つの**付加条件** *supplementary condition* として課せられねばならないことは, 古典論の場合と事情は同じである. つまり, ある特定の時刻に $\nabla\cdot\mathbf{P}$ を零に等しいとおけば, $\nabla\cdot\mathbf{P}$ の時間についての微係数が零である以上, それは常に零になる. そうすれば（56.9）から $\nabla\cdot\mathbf{A}$ の時間についての微係数が常に零, したがって $\nabla\cdot\mathbf{A}$ は時間について一定ということがわかる. ところで, ゲージの選び方をさらに制限して $\nabla\cdot\mathbf{A}$ がある特定の時刻にすべての場所で零になっているように選んでおくのが便利である. この場合, $\nabla\cdot\mathbf{A}$ はすべての時空点において零になっていることがわかる. しかし, この補助条件を導入することは交換関係（56.8）とは両立しないことは明らかである. たとえば, $\nabla\cdot\mathbf{P}=0$ である以上 A_x と $\nabla\cdot\mathbf{P}$ との間の交換子括弧は零になるべきであるが（56.8）から計算した結果は

$$[A_x(\mathbf{r},t),\nabla'\cdot\mathbf{P}(\mathbf{r}',t)]=i\hbar\frac{\partial}{\partial x'}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

となる. この種の矛盾が生じるだろうということは次のことを考えれば驚くべきことではない. というのは, 本来三対の独立な正準変数があるはずであるが, $\nabla\cdot\mathbf{P}=0$ および $\nabla\cdot\mathbf{A}=0$ という制限条件の結果これらの中の二組だけが一次独立なものになるからである. したがって, 交換関係を補助条件と両立するように修正しておかなければならない.

どのような性質の修正を行なえばよいかということは問題11で明らかにされている. 結果を言えば, $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ と $\mathbf{P}(\mathbf{r}',t)$ との交換子括弧は $\mathbf{r}-\mathbf{r}'$ が有限の場合に零にならないことになるのである. 一寸考えると, この結果は電磁場が有限の伝播速度をもつものである以上同一時刻での異なった場所において行なわれた電磁場の測定の間には干渉

が起り得ないという物理的な原則と矛盾しているように思われるかも知れない．しかしながら，ベクトルポテンシャル $\mathbf{A}$ はそれ自身では物理的な量ではないのであって，電場および磁場のみが直接測定しうるものなのである．そこで，(56.8) を使って E と H との交換関係が要請された無限小性をもつこと，さらにそれは補助条件 $\nabla\cdot\mathsf{E}=0$ と両立しうることを次に示すことにしよう．問題11の修正された正準交換関係から出発してもやはり同一の結果が得られることを示すことができる（問題12を見よ）．

56-4 E と H との交換関係

電場および磁場は次の方程式によって定義される．

$$\mathsf{E}=-4\pi c\mathbf{P},\qquad \mathsf{H}=\nabla\times\mathbf{A} \tag{56.10}$$

ただし，$\mathbf{A}$ と $\mathbf{P}$ との交換関係としては (56.8) の形のものを仮定しておく．直ちにわかるように

$$[\mathsf{E}_s(\mathbf{r},t),\mathsf{E}_{s'}(\mathbf{r}',t)]=[\mathsf{H}_s(\mathbf{r},t),\mathsf{H}_{s'}(\mathbf{r}',t)]=0 \tag{56.11}$$

となる．ただし，添字 s, s' の各々は x, y, z のいずれかを示すものとする．E と H との平行な成分間の交換子括弧の代表的なものは次のようになる．

$$[\mathsf{E}_x(\mathbf{r},t),\mathsf{H}_x(\mathbf{r}',t)]=-4\pi c\left[P_x,\left(\frac{\partial A'_z}{\partial y'}-\frac{\partial A'_y}{\partial z'}\right)\right]=0 \tag{56.12}$$

E と H の直交している成分に対する代表的な交換関係としては，次式を得る．

$$\begin{aligned}[\mathsf{E}_x(\mathbf{r},t),\mathsf{H}_y(\mathbf{r}',t)]&=-4\pi c\left[P_x,\left(\frac{\partial A'_x}{\partial z'}-\frac{\partial A'_z}{\partial x'}\right)\right]\\&=-4\pi c\frac{\partial}{\partial z'}[P_x,A'_x]\\&=4\pi ci\hbar\frac{\partial}{\partial z'}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\end{aligned} \tag{56.13}$$

(56.13) 以外の同様な関係式は x, y, z の輪換によって求められる．

$\nabla\cdot\mathsf{E}$ が E のすべての成分と可換であることが (56.11) から直ちに導かれる．$\nabla\cdot\mathsf{E}$ と H の代表的な一つの成分との交換子括弧は (56.13) を使って次のようになる．

$$\begin{aligned}[\nabla\cdot\mathsf{E},\ \mathsf{H}'_x]&=\left[\frac{\partial\mathsf{E}_y}{\partial y},\ \mathsf{H}'_x\right]+\left[\frac{\partial\mathsf{E}_z}{\partial z},\ \mathsf{H}'_x\right]\\&=4\pi ci\hbar\left[-\frac{\partial}{\partial y}\frac{\partial}{\partial z'}\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})+\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial y'}\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})\right]\end{aligned} \tag{56.14}$$

$(\partial/\partial y')\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})=-(\partial/\partial y)\delta^3(\mathbf{r}'-\mathbf{r})$ であることから，(56.14) の右辺は零になることがわかる．結局 $\nabla\cdot\mathbf{E}$ は $\mathbf{E}$ および $\mathbf{H}$ と可換で，したがってまたハミルトニアンとも可換である．なぜなら (56.7) によりハミルトニアンは次の形に書くことができるからである．

$$H=\frac{1}{8\pi}\int(\mathbf{E}^2+\mathbf{H}^2)d^3r \tag{56.15}$$

この結果は $\nabla\cdot\mathbf{E}$ が運動の恒量であり，したがってある特定の時刻にすべての場所で零になっているようにとっておけばあらゆる時空点で零であることを意味している．

当然予想されるように，場の交換関係 (56.11)，(56.12) および (56.13) に，(56.15) のハミルトニアンを一緒にしたものは，$\mathbf{A}$ および $\mathbf{P}$ を使って述べられている最初の正準形式の代りに用いることができるものである．すでに示されたように $\nabla\cdot\mathbf{E}$ は運動の恒量になっている；同種の計算をして $\nabla\cdot\mathbf{H}$ もまた一定であることが示され，したがってあらゆる時空点で零になるようにすることができる．したがって (56.1) の Maxwell 方程式の最初の二つの式は (54.23) の一般的な運動方程式の特別の場合として導かれることになる (問題14を見よ)：

$$\begin{aligned}
i\hbar\dot{\mathrm{E}}_x&=[\mathrm{E}_x, H]=\frac{1}{8\pi}\int[\mathrm{E}_x, (\mathrm{H}'^2_y+\mathrm{H}'^2_z)]d^3r' \\
&=i\hbar c(\nabla\times\mathbf{H})_x \\
i\hbar\dot{\mathrm{H}}_x&=[\mathrm{H}_x, H]=\frac{1}{8\pi}\int[\mathrm{H}_x, \quad (\mathrm{E}'^2_y+\mathrm{E}'^2_z)]d^3r' \\
&=-i\hbar c(\nabla\times\mathbf{E})_x
\end{aligned} \tag{56.16}$$

56-5 平面波による表示

量子電磁力学を応用する際，平面波の完全規格化直交系によるポテンシャルや場の表示が便利である．この種の平面波としては $\nabla\cdot\mathbf{A}=\nabla\cdot\mathbf{P}=0$ という条件が満たされるように，伝播ベクトルに垂直の方向に偏っている $\mathbf{r}$ のベクトル関数をとることにする．

$$\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})=L^{-\frac{3}{2}}\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}) \qquad \lambda=1,2$$

ベクトル $\mathbf{k}$ を (11.3) のように選んでおけば，$\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}$ は体積 L^3 の大きな立方形の箱の境壁上で周期的な境界条件を満たしていることになる．$\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}$ は単位ベクトルで $\varepsilon_{\mathbf{k}_1}, \varepsilon_{\mathbf{k}_2}$ および $\mathbf{k}$ の三つのベクトルが一つの右手系をつくっているものとすれば，$\mathbf{k}\cdot\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}=0$ かつ

$\nabla \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}=0$ が成り立つ．規格直交性は次の形で成立していることは容易に証明される．

$$\int \mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}{}^* \cdot \mathbf{u}_{\mathbf{k}'\lambda'} d^3r=\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'}$$

$\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}$ を使って $\mathbf{A}$ および $\mathbf{P}$ を次のように展開しておく．

$$\begin{aligned}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)&=\sum_{\mathbf{k}\lambda}{}'\,[q_{\mathbf{k}\lambda}(t)\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})+q_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger(t)\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}{}^*(\mathbf{r})]\\ \mathbf{P}(\mathbf{r},t)&=\sum_{\mathbf{k}\lambda}{}'\,[p_{\mathbf{k}\lambda}(t)\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}(\mathbf{r})+p_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger(t)\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}{}^*(\mathbf{r})]\end{aligned} \tag{56.17}$$

$q_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger, p_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger$ は演算子でそれぞれ $q_{\mathbf{k}\lambda}, p_{\mathbf{k}\lambda}$ のエルミット共軛になっている；したがって $\mathbf{A}$ および $\mathbf{P}$ はエルミット演算子である．和のダッシュは平面波 $\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}{}^*$ が $\mathbf{u}_{-\mathbf{k}\lambda}$ の重復にならないように $\mathbf{k}$ 空間の半分について和をとることを示しているものである．

q および p の間の交換関係としては次のものをとる．

$$[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^\dagger(t)]=[q_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)]=i\hbar\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda'\lambda} \tag{56.18}$$

ただし他のすべての組合わせでは可換とする．これらの交換関係から $\mathbf{A}$ と $\mathbf{P}$ との間の正しい交換関係が与えられることを確かめておこう．まず明らかに

$$[A_s(\mathbf{r},t), A_{s'}(\mathbf{r}',t)]=[P_s(\mathbf{r},t), P_{s'}(\mathbf{r}',t)]=0$$

である．さらに，(56.17) と (56.18) とから次の関係が得られる．

$$\begin{aligned}[A_s(\mathbf{r},t), P_{s'}(\mathbf{r}',t)]&=\sum_{\mathbf{k}\lambda}{}'\sum_{\mathbf{k}'\lambda'}{}'\,\{[q_{\mathbf{k}\lambda}(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^\dagger(t)]u_{\mathbf{k}\lambda,s}(\mathbf{r})u^*{}_{\mathbf{k}'\lambda',s'}(\mathbf{r}')\\ &\quad+[q_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger(t), p_{\mathbf{k}'\lambda'}(t)]u_{\mathbf{k}\lambda,s}{}^*(\mathbf{r})u_{\mathbf{k}'\lambda',s'}(\mathbf{r}')\}\\ &=i\hbar L^{-3}\sum_{\mathbf{k}\lambda}\epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s}\epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s'}\exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]\end{aligned} \tag{56.19}$$

添字 s, s' は，その添字のついた直交座標方向についてのそのベクトルの成分を示すものとする；(56.19) の最後の和ではダッシュを落してあるのは，$\mathbf{k}$ の項と $-\mathbf{k}$ の項双方についてダッシュのついた和をとることは，$\mathbf{k}$ の項だけについて $\mathbf{k}$ 空間全体にわたって和をとることと同等だからである．

もしも互いに垂直な三つの単位ベクトル $\epsilon_{\mathbf{k}\lambda}$ があれば，$\epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s}$ という三つの数は s という直交軸の方向の方向余弦になっているはずで，$\sum_\lambda \epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s}\epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s'}=\delta_{ss'}$ となるわけである．実際には丁度二つの単位ベクトル $\epsilon_{\mathbf{k}\lambda}$ があって，互いに直交しかつ $\mathbf{k}$ に直交しているのだから結局次のように書くことができる．

$$\sum_\lambda \epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s}\epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s'}=\delta_{ss'}-\frac{k_s k_{s'}}{k^2}$$

さらにまた，次の関係がある

$$k_s k_{s'} \exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]=\frac{\partial}{\partial r_s}\frac{\partial}{\partial r'_{s'}}\exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]$$

これらの関係を使い，かつLが大きいとして $L^{-3}\sum_{\mathbf{k}}$ を $(2\pi)^{-3}\int d^3k$ で置き換えると(56.19)は次のように書きかえられる．

$$[A_s(\mathbf{r},t),P_{s'}(\mathbf{r}',t)]=i\hbar\delta_{ss'}\left\{(2\pi)^{-3}\int\exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]d^3k\right\}$$
$$-i\hbar\frac{\partial}{\partial r_s}\frac{\partial}{\partial r'_{s'}}\left\{(2\pi)^{-3}\int\frac{1}{k^2}\exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{r}')]d^3k\right\}\tag{56.20}$$

(56.20)の右辺の第一項の中括弧の部分は $\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$ に等しく，第二項の中括弧の部分は(37.18)式の一つの特殊な場合として計算することができて，$(4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)^{-1}$ に等しくなる．結局，(56.20)の交換子括弧は，問題11で仮定されている次のような形になる．

$$[A_s(\mathbf{r},t),P_{s'}(\mathbf{r}',t)]=i\hbar\delta_{ss'}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-\frac{i\hbar}{4\pi}\frac{\partial}{\partial r_s}\frac{\partial}{\partial r'_{s'}}\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)\tag{56.21}$$

他の交換子括弧は零になる．これで(56.18)の交換関係の選び方の正しさが確かめられたわけである．

56-6　量子化された場のエネルギー

場のハミルトニアンの(56.7)に(56.17)を代入すれば $q_{\mathbf{k}\lambda}$ と $q_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ および $p_{\mathbf{k}\lambda}$ と $p_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ は可換であるから，次式を得る；

$$H=\sum_{\mathbf{k}\lambda}{}'\left(4\pi c^2 p_{\mathbf{k}\lambda}p_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger+\frac{k^2}{4\pi}q_{\mathbf{k}\lambda}q_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger\right)\tag{56.22}$$

ただし，ここで$\mathbf{k}$についての和は$\mathbf{k}$空間の半分に制限してとってあるため，$\int\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\mathbf{u}_{\mathbf{k}'\lambda'}d^3r$ という形の積分は全部零になることが使われている．

ところで，交換関係が(56.18)のような形で与えられているときのHの固有値を求めたいわけである．このためには平面波振幅の一次結合を適当に選んで，Hが多数の調和振動子のエネルギーの和に形式的に同等であるようにしてやればよい（§55を見よ）．さて，$\mathbf{k},\lambda$ という一対の添字のそれぞれは$\mathbf{k}$方向に平行に互いに逆向きに伝播してゆく二つの線偏光平面波に対応している．したがってここで求めている $q_{\mathbf{k}\lambda}\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}$ と $p_{\mathbf{k}\lambda}\mathbf{u}_{\mathbf{k}\lambda}$ の新しい一次結合は，$a_{\mathbf{k}\lambda}, a'_{\mathbf{k}\lambda}$ を $\mathbf{r},t$ に無関係な演算子として，次の一般形を

もつものと考えておいてよい.

$$a_{\mathbf{k}\lambda}\exp i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-kct), \qquad a'_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}\exp i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}+kct) \tag{56.23}$$

これらのうち，第一の形のものは $\mathbf{k}$ の正の方向に正の角振動数 kc で伝播する平面波で，第二のものは $\mathbf{k}$ の負の方向に同じ角振動数で伝播する平面波のエルミット共役になっている.

すぐ上のパラグラフで述べたような方針の下で，まず $q_{\mathbf{k}\lambda}$ および $p_{\mathbf{k}\lambda}$ の時間による変化の仕方を求めることから始める．これらの演算子の運動方程式は (54.23) によって与えられている：

$$\begin{aligned} i\hbar\dot{q}_{\mathbf{k}\lambda}&=[q_{\mathbf{k}\lambda},H]=4\pi i\hbar c^2 p_{\mathbf{k}\lambda}\\ i\hbar\dot{p}_{\mathbf{k}\lambda}&=[p_{\mathbf{k}\lambda},H]=-\frac{i\hbar k^2}{4\pi}q_{\mathbf{k}\lambda}\end{aligned} \tag{56.24}$$

$p_{\mathbf{k}\lambda}$ を消去すると $q_{\mathbf{k}\lambda}$ に対する二階の方程式として次のものが得られる.

$$\ddot{q}_{\mathbf{k}\lambda}=4\pi c^2\dot{p}_{\mathbf{k}\lambda}=-k^2c^2q_{\mathbf{k}\lambda}$$

この方程式は容易に積分されて，その結果を (56.23) で示されている形式に応じて書けば次のようになる.

$$q_{\mathbf{k}\lambda}(t)=a_{\mathbf{k}\lambda}e^{-ikct}+a'_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}e^{ikct} \tag{56.25}$$

ここで (56.24) の第一式を使えば，$p_{\mathbf{k}\lambda}$ に対して次の表式が得られる.

$$p_{\mathbf{k}\lambda}(t)=-\frac{ik}{4\pi c}a_{\mathbf{k}\lambda}e^{-ikct}+\frac{ik}{4\pi c}a'_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}e^{ikct} \tag{56.26}$$

(56.25) と (56.26) の方程式は a についてとくことができて

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{k}\lambda}&=\tfrac{1}{2}\left(q_{\mathbf{k}\lambda}+\frac{4\pi ic}{k}p_{\mathbf{k}\lambda}\right)e^{ikct}\\ a'_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}&=\tfrac{1}{2}\left(q_{\mathbf{k}\lambda}-\frac{4\pi ic}{k}p_{\mathbf{k}\lambda}\right)e^{-ikct}\end{aligned} \tag{56.27}$$

となる．同様な関係がこれらのエルミット共役な量に対しても成立する．a に対する交換関係は (56.27) および (56.18) から求められる：

$$[a_{\mathbf{k}\lambda},a_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}]=[a'_{\mathbf{k}\lambda},a'_{\mathbf{k}'\lambda'}{}^{\dagger}]=\frac{2\pi\hbar c}{k}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\delta_{\lambda\lambda'} \tag{56.28}$$

この他の組合せは全部可換である；これらの交換関係は当然期待されるように時間に無関係になっている.

(56.25) と (56.26) をハミルトニアン (56.22) に代入すれば

$$H=\sum_{\mathbf{k}\lambda}{}'\frac{k^2}{2\pi}(a_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger+a'_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger a'_{\mathbf{k}\lambda}) \tag{56.29}$$

となる．ここで

$$N_{\mathbf{k}\lambda}=\frac{k}{2\pi\hbar c}a_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger a_{\mathbf{k}\lambda},\qquad N'_{\mathbf{k}\lambda}=\frac{k}{2\pi\hbar c}a'_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger a'_{\mathbf{k}\lambda} \tag{56.30}$$

という定義を採用することにすれば，§55 での議論から $N_{\mathbf{k}\lambda}$ および $N'_{\mathbf{k}\lambda}$ は 0, 1, 2･･･の固有値をもつことがわかる．これらのNを使うと（56.29）のハミルトニアンは

$$H=\sum_{\mathbf{k}\lambda}{}'\hbar ck(N_{\mathbf{k}\lambda}+N'_{\mathbf{k}\lambda}+1) \tag{56.31}$$

となる．（56.23）および（56.25）の両式の構造から考えて，$a'_{\mathbf{k}\lambda}$ を $a_{-\mathbf{k}\lambda}$ と，$N'_{\mathbf{k}\lambda}$ を $N_{-\mathbf{k}\lambda}$ と同一視することができる．そうすれば（56.31）の和を$\mathbf{k}$空間の半分に限るという制限を除くことができて次式が得られる．

$$H=\sum_{\mathbf{k}\lambda}\hbar ck(N_{\mathbf{k}\lambda}+\tfrac{1}{2}) \tag{56.32}$$

（56.32）式は Planck の量子仮設に同等なものである：つまり平面電磁波の各々に付随しているエネルギーが基本的な量子 $\hbar\nu=\hbar kc$ の整数倍になっていることを表わしている．ただし，場の各状態当りに半量子づつの調和振動子の零点エネルギーが，Planck のエネルギーに付け加わっている．この付け加わったエネルギーは場が無限個の状態をもつため無限大になる．しかし，この無限大の零点エネルギーは荷電をもった物質と相互作用しない限り邪魔にはならないわけである[1]．

56-7 量子化された場の運動量

電磁場の運動量密度は Poynting ベクトル $(c/4\pi)\mathbf{E}(\mathbf{r},t)\times\mathbf{H}(\mathbf{r},t)$ を c^2 で割ったものである．場の全運動量はこれと積分して求められるが，（56.10）を使えばそれを正準変数によって書き表わすことができて，

$$\mathbf{G}=\frac{1}{4\pi c}\int\mathbf{E}\times\mathbf{H}d^3r=-\int\mathbf{P}\times(\nabla\times\mathbf{A})d^3r$$

となる．これに（56.17），（56.25），（56.26）および（56.30）を代入すれば次式が得られる．

$$\mathbf{G}=i\sum_{\mathbf{k}\lambda}{}'\mathbf{k}(p_{\mathbf{k}\lambda}q_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger-p_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger q_{\mathbf{k}\lambda})$$

1）なお §57 の末尾の議論を参照のこと．

$$=\frac{1}{4\pi c}\sum_{\mathbf{k}\lambda}{}' \mathbf{k}k[(a_{\mathbf{k}\lambda}a_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}+a_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}a_{\mathbf{k}\lambda})-(a'_{\mathbf{k}\lambda}a'_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}+a'_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}a'_{\mathbf{k}\lambda})]$$

$$=\sum_{\mathbf{k}\lambda}{}' \hbar\mathbf{k}[(N_{\mathbf{k}\lambda}+\tfrac{1}{2})-(N'_{\mathbf{k}\lambda}+\tfrac{1}{2})]=\sum_{\mathbf{k}\lambda}\hbar\mathbf{k}N_{\mathbf{k}\lambda} \tag{56.33}$$

最後のところで，(56.31) から (56.32) に移ったのと同様にして和についての制限が除かれている．今度の場合，零点エネルギーの項は互いに逆方向に伝播する平面波同志で打ち消しあっている．

(56.32) および (56.33) の表式からわかるように，各平面波のエネルギー，運動量はエネルギーの単位としては $\hbar kc$，運動量の単位としては $\hbar\mathbf{k}$ で量子化されたわけである．なお，この量子化された電磁場は古典的な光速度で伝播することは，この節の末尾で具体的に示すことにしよう．

56-8 $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ の平面波による表示

次節で論じられる荷電粒子と電磁場との相互作用を記述する際ベクトルポテンシャルが入ってくる．したがって演算子 $N_{\mathbf{k}\lambda}$ の固有値 $n_{\mathbf{k}\lambda}$ で指定される平面波表示での $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ の表式が必要になってくる．この表示に対応するケットの代表的なものは $|\cdots n_{\mathbf{k}\lambda}\cdots\rangle$ と書くことができる．これは運動量が $\hbar\mathbf{k}$ で偏りが $\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}$ の $n_{\mathbf{k}\lambda}$ 個の光量子が存在する電磁場の状態を記述するものである．このケットに対して $a_{\mathbf{k}\lambda}$ および $a_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}$ は次の性質をもっていることが (56.28) 式および55節の議論から明らかである．

$$\begin{aligned}a_{\mathbf{k}\lambda}\Big|\cdots n_{\mathbf{k}\lambda}\cdots\Big\rangle&=\left(\frac{2\pi\hbar c n_{\mathbf{k}\lambda}}{k}\right)^{\frac{1}{2}}\Big|\cdots n_{\mathbf{k}\lambda}-1\cdots\Big\rangle\\ a_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}\Big|\cdots n_{\mathbf{k}\lambda}\cdots\Big\rangle&=\left[\frac{2\pi\hbar c(n_{\mathbf{k}\lambda}+1)}{k}\right]^{\frac{1}{2}}\Big|\cdots n_{\mathbf{k}\lambda}+1\cdots\Big\rangle\end{aligned} \tag{56.34}$$

(56.17) および (56.25) から $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ の表式として次のものが得られる．

$$\begin{aligned}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)&=L^{-\frac{3}{2}}\sum_{\mathbf{k}\lambda}{}'\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}[(a_{\mathbf{k}\lambda}e^{-ikct}+a'_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}e^{ikct})\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\\&\qquad+(a_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}e^{ikct}+a'_{\mathbf{k}\lambda}e^{-ikct})\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})]\\&=L^{-\frac{3}{2}}\sum_{\mathbf{k}\lambda}\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}\{a_{\mathbf{k}\lambda}\exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-kct)]+a_{\mathbf{k}\lambda}{}^{\dagger}\exp[-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-kct)]\}\end{aligned} \tag{56.35}$$

ここでもやはり $a'_{\mathbf{k}\lambda}$ を $a_{-\mathbf{k}\lambda}$ と同一視することにして $\mathbf{k}$ についての和の制限は除いてある．当然のことではあるが，ベクトルポテンシャルのこの表式から，それがエルミット

演算子になっていることが容易にわかる．また(56.34)式の構造から，$a_{\mathbf{k}\lambda}$ および $a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger$ がそれぞれ $\mathbf{k},\lambda$ で指定される状態の一つの光子を消滅または生成する演算子になっていることが結論される．したがって，ハミルトニアン中の **A** について一次の項は光量子の吸収および放出という結果を生じることになるわけである．

56-9 異なった時刻での交換関係

E および **H** の各成分に対する交換関係 (56.11)，(56.12) および (56.13) を時刻が異なる場合に拡張することは興味のある問題である[1]．この拡張された結果から，相異なった二つの時空点での電磁場の測定がどんな具合に互いに影響をおよぼし合うかということが明らかになる．

(56.35) 式に類似の **E** および **H** の $a_{\mathbf{k}\lambda}$ を使った展開式は比較的容易に求めることができて次のようになる．

$$\begin{aligned}\mathbf{E}(\mathbf{r},t)&=L^{-\frac{3}{2}}\sum_{\mathbf{k}\lambda}ik\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}\{a_{\mathbf{k}\lambda}\exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-kct)]\\&\qquad-a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger\exp[-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-kct)]\}\\\mathbf{H}(\mathbf{r},t)&=L^{-\frac{3}{2}}\sum_{\mathbf{k}\lambda}i(\mathbf{k}\times\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda})\{a_{\mathbf{k}\lambda}\exp[i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-kct)]\\&\qquad-a_{\mathbf{k}\lambda}^\dagger\exp[-i(\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-kct)]\}\end{aligned}\tag{56.36}$$

電場の強さの二つの直交成分間の交換関係は (56.28) を使って次のようになる．

$$\begin{aligned}&[\mathrm{E}_s(\mathbf{r},t),\mathrm{E}_{s'}(\mathbf{r}',t')]=L^{-3}\sum_{\mathbf{k}\lambda}4\pi i\hbar ck\epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s}\epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s'}\sin(\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\varrho}-kc\tau)\\&\boldsymbol{\varrho}=\mathbf{r}-\mathbf{r}',\qquad\tau=t-t'\end{aligned}\tag{56.37}$$

偏りを示す添字 λ についての和は (56.19) の同種の和をとるときに用いた方法で計算することができる：

$$\begin{aligned}\sum_\lambda\epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s}\epsilon_{\mathbf{k}\lambda,s'}\sin(\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\varrho}-kc\tau)&=\frac{1}{k^2}(k^2\delta_{ss'}-k_sk_{s'})\sin(\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\varrho}-kc\tau)\\&=\frac{1}{k^2}\left[\frac{\delta_{ss'}}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{\partial}{\partial r_s}\frac{\partial}{\partial r'_{s'}}\right]\sin(\mathbf{r}\cdot\boldsymbol{\varrho}-kc\tau)\end{aligned}\tag{56.38}$$

$\mathbf{k}$ についての和は L を大きいとして積分で置き換えて計算することができる：

---

1) この種の交換関係は P. Jordan und W. Pauli ; *Zeits. f. Physik* **47**, 151 (1928) によるものである．

$$L^{-3}\sum_{\mathbf{k}} k^{-1}\sin(\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\varrho}-kc\tau)\xrightarrow[L\to\infty]{}(2\pi)^{-3}\int k^{-1}\sin(k\cdot\boldsymbol{\varrho}-kc\tau)d^3k$$
$$=-(4\pi^2\rho)^{-1}\int_0^\infty[\cos(k\rho-kc\tau)-\cos(k\rho+kc\tau)]dk$$

$\mathbf{k}$ と $\boldsymbol{\varrho}$ との間の角についての積分を行なった後に得られたこの最後の表式を $D(\boldsymbol{\varrho},\tau)$ とよぶことにする．そうすると，(11.10) 式を利用してこの D を δ 関数で表わすことができて，

$$D(\boldsymbol{\varrho},\tau)=(4\pi\rho)^{-1}[\delta(\rho+c\tau)-\delta(\rho-c\tau)] \tag{56.39}$$

となる．結局，(56.37) および (56.38) から次の結果が得られる．

$$[\mathsf{E}_s(\mathbf{r},t),\mathsf{E}_{s'}(\mathbf{r}',t')]$$
$$=4\pi i\hbar c\left(\frac{\delta_{ss'}}{c^2}\frac{\partial}{\partial t}\frac{\partial}{\partial t'}-\frac{\partial}{\partial r_s}\frac{\partial}{\partial r'_{s'}}\right)D(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t') \tag{56.40}$$

磁場の強さの二つの直交成分間の交換関係も同様なやり方で求めることができて，

$$[\mathsf{H}_s(\mathbf{r},t),\mathsf{H}_{s'}(\mathbf{r}',t')]=[\mathsf{E}_s(\mathbf{r},t),\mathsf{E}_{s'}(\mathbf{r}',t')] \tag{56.41}$$

となる．

E と **H** の成分間の交換関係もやはり (56.36) から求めることができる．

$$[\mathsf{E}_s(\mathbf{r},t),\mathsf{H}_{s'}(\mathbf{r}',t')]$$
$$=L^{-3}\sum_{\mathbf{k}}4\pi i\hbar ck(\epsilon_{\mathbf{k}_1,s}\epsilon_{\mathbf{k}_2,s'}-\epsilon_{\mathbf{k}_2,s}\epsilon_{\mathbf{k}_1,s'})\sin(\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\varrho}-kc\tau) \tag{56.42}$$

明らかに $s=s'$ であれば (56.42) は零になる．つまり，電場および磁場の平行な成分はあらゆる時空点で可換になる．$s\neq s'$ の場合，x,y,z を右手系の座標軸をつくっているとして $s=x$，$s'=y$ と置くことができ，この場合次の関係が成立することがわかる．

$$\epsilon_{\mathbf{k}_1,x}\epsilon_{\mathbf{k}_2,y}-\epsilon_{\mathbf{k}_2,x}\epsilon_{\mathbf{k}_1,y}=(\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}_1}\times\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}_2})_z=\frac{k_z}{k}$$

そこで (56.37) から (56.40) を導いたのと同様な手続きをふめば次の関係を証明できる．

$$[\mathsf{E}_x(\mathbf{r},t),\mathsf{H}_y(\mathbf{r}',t')]=-4\pi i\hbar\frac{\partial}{\partial z}\frac{\partial}{\partial t'}D(\mathbf{r}-\mathbf{r}',t-t') \tag{56.43}$$

(56.43) の関係は添字の x,y,z は循環的に置き換えても成立する．

この種の交換関係はすべて (56.39) の D 関数を含んでいるから，場の強さの諸成分は四次元時空内の超曲面 $c(t-t')=\pm|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ の無限小近傍を除いたところでは可換になっていることがわかる．この超曲面は時刻 $t=t'$ に空間点 $\mathbf{r}=\mathbf{r}'$ を通過するすべ

ての光パルスの軌跡，すなわち**光円錐** ***light cone*** を構成している．つまり光のシグナルが一方から他方へ到達しえないような配置にある時空点での電磁場の強さなるものは互いに可換すなわちともに正確に測定することができるわけである．このことは量子化された電磁場が古典論での光速 c で伝播していることを示している．これらの交換関係と不確定性原理との関連性についての議論は Bohr および Rosenfeld によって行なわれている[1]．

57□荷電粒子と電磁場との相互作用

ここでは（§55の）非相対論的 Schrödinger 方程式の量子化を（§56 の）Maxwell 方程式の量子化と結びつけて，荷電粒子と電磁場との相互作用の量子論を求めることにしよう．これまでと同様に，先ず古典論でのラグランジアンから出発し，それを使って正準変数とハミルトニアンを求め，その後で量子化を遂行する．このようにして得られた理論形式を，荷電粒子間のクーロン相互作用の計算，さらに輻射の放出および吸収の過程に適用することにする．後者の議論は第XI章の理論に，より健全な基礎を提供することを可能にすることになる．

57-1 ラグランジ方程式とハミルトン方程式

求めるラグランジアンは，ψ^* および ψ の変分によって（44.1）の非相対論的 Schrödinger 方程式およびその複素共役式がそれぞれに与えられるばかりか，さらに $\mathbf{A}$ および ϕ の変分によって（44.2）の非斉次 Maxwell 方程式が与えられるものでなければならない．（55.1）と（55.2）のラグランジアン密度の和をとったものは，（55.1）で

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}\to i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}-e\phi\psi \qquad -i\hbar\nabla\psi\to -i\hbar\nabla\psi-\frac{e}{c}\mathbf{A}\psi \tag{57.1}$$

という置き換えを行なっておけばこれらの性質をもつことになる．ただし，e は粒子の荷電である．このことは次のことを意味している．すなわち，（44.2）に現われている荷電と電流密度は（7.1）と（7.3）に e を掛けて（57.1）の置き換えを行なって求められるものなのである：

---

1) N. Bohr and L. Rosenfeld, *Kgl. Danske Videnskab. Selskab, Mat.-Fys. Medd.* **12**, 8 (1933).

$$\rho=e\psi^*\psi \qquad \mathbf{J}=\frac{e\hbar}{2im}[\psi^*\nabla\psi-(\nabla\psi^*)\psi]-\frac{e^2}{mc}\mathbf{A}\psi^*\psi \tag{57.2}$$

第XI章の問題2で証明されたように，ψ が（44.1）の一つの解になっているときには，この ρ および $\mathbf{J}$ は連続方程式を満たす．要するに求めるラグランジアン密度は次のものであることになる．

$$L=\psi^*\left(i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}-e\phi\psi\right)-\frac{1}{2m}\left[\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^*\right]\cdot\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\right]$$
$$-V\psi^*\psi+\frac{1}{8\pi}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}+\nabla\phi\right)^2-\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2 \tag{57.3}$$

（44.1）および（44.2）が実際に（57.3）および（54.8）から確かに導かれることは問題17で証明されている．

（55.1）および（56.3）に関連して先に注意した欠点については，（57.3）の式もまた免れていない．つまり（57.3）には ψ^* および ϕ の時間についての微係数があらわれていないから，これらの量に対応する正準運動量は定義できない．したがってハミルトニアンを使う理論形式からは座標変数としての ψ^* および ϕ を消去しておかねばならない．前の場合と同様に，ψ に対して正準共役な運動量は $i\hbar\psi^*$ で，$\mathbf{A}$ の成分に対して正準共軛な運動量は $\mathbf{P}=(4\pi c)^{-1}[(1/c)(\partial\mathbf{A}/\partial t)+\nabla\phi]$ の成分である．したがってハミルトニアンは

$$H=\int\left(i\hbar\psi^*\frac{\partial\psi}{\partial t}+\mathbf{P}\cdot\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\right)d^3r-L$$
$$=\int\left\{\frac{1}{2m}\left[\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^*\right]\cdot\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\right]+e\phi\psi^*\psi\right.$$
$$\left.+V\psi^*\psi+2\pi c^2\mathbf{P}^2+\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2-c\mathbf{P}\cdot\nabla\phi\right\}d^3r \tag{57.4}$$

となって，ψ^* が一つの正準運動量変数としてあらわれることになる．ψ とその正準運動量 $i\hbar\psi^*$ に対するハミルトンの運動方程式がそれぞれ（44.1）およびその複素共役式になることを示すのは難しいことではない．$\mathbf{A}$ および $\mathbf{P}$ に対するハミルトン方程式は $\mathbf{J}$ を（57.2）で与えられるものとして，

$$\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}=4\pi c^2\mathbf{P}-c\nabla\phi$$
$$\frac{\partial\mathbf{P}}{\partial t}=-\frac{1}{4\pi}\nabla\times\nabla\times\mathbf{A}+\frac{1}{c}\mathbf{J} \tag{57.5}$$

となる．そこで §56 と同様に，$\mathbf{E}=-4\pi c\mathbf{P}$，かつ $\mathbf{H}=\nabla\times\mathbf{A}$ という定義をとれば，Maxwell 方程式 (44.2) の第一，第二および第四式が得られることになる．

57-2 ϕ の 消 去

Maxwell 方程式 (44.2) の第三式は §56 での対応する式がそうであったように一つの付加条件として得られるべきものである．つまりハミルトン方程式の解の中で，あるきまった時刻に $\nabla\cdot\mathbf{E}-4\pi e\psi^*\psi=0$ を満たしているものだけを問題にすることになる．そうしておいてこの条件式の左辺の量の時間について微係数が零だということになれば，この制限条件はあらゆる時刻に維持されてゆくことになり，最初のように選んでおいた解が首尾一貫した，十分利用できる組をつくっていることになるわけである．(57.2) の第一式と (57.5) 第二式とさらに $\mathbf{E}$ の定義式を使えば

$$\frac{\partial}{\partial t}(\nabla\cdot\mathbf{E}-4\pi e\psi^*\psi)=-4\pi\nabla\cdot\mathbf{J}-4\pi\frac{\partial\rho}{\partial t}$$

となるが，この式は荷電，電流密度に対する連続方程式によって確かに零になる．

次に，(57.4) の右辺で ϕ を含む二つの項は互いに打ち消し合うことが示される．ϕ を含む二番目の項は部分積分することができて

$$-c\int\mathbf{P}\cdot\nabla\phi d^3r=c\int\phi\nabla\cdot\mathbf{P}d^3r=-\int\phi\rho\, d^3r$$

となる．これは ϕ を含む第一項 $e\int\phi\psi^*\psi d^3r$ に大きさは等しく符号は反対である．結局，ϕ はハミルトニアンからは消えてしまうことになり，その選び方は便利なように任意にできることになる．この選び方として $\mathbf{P}$ (または $\mathbf{E}$) を**ソレノイド的** *solenoidal* な部分と**非回転的** *irrotational* な部分に分け，後者は ϕ だけで完全にきまるようにとることにする．すなわち，次のようにおく．

$$\begin{aligned}&\mathbf{P}=\mathbf{P}_1+\mathbf{P}_2\\&\nabla\cdot\mathbf{P}_1=0\quad(\mathbf{P}_1：ソレノイド的な部分)\\&\nabla\times\mathbf{P}_2=0\quad(\mathbf{P}_2：非回転的部分)\end{aligned}\tag{57.6}$$

さらに $\mathbf{P}_2=(4\pi c)^{-1}\nabla\phi$ とおけば (57.6) の第三式は満たされており，かつ (57.5) の第一式は

$$\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}=4\pi c^2\mathbf{P}_1\tag{57.7}$$

となる．ところで (57.7) と (57.6) 式から $(\partial/\partial t)\nabla\cdot\mathbf{A}=0$ が示されるから，ある任意の時刻で $\nabla\cdot\mathbf{A}=0$ になっておれば，あらゆる時刻において $\nabla\cdot\mathbf{A}=0$ とおくことができる．したがってポテンシャルのゲージを $\nabla\cdot\mathbf{A}=0$ になるように選ぶことにする．この選び方を指すのに普通**輻射ゲージ** *radiation gauge* または**クーロン・ゲージ** *coulomb gauge* というよび方が用いられている．というのは，このようにゲージをとると，輻射場は $\mathbf{P}_1$ または $\mathbf{A}$ によって記述され，クーロン相互作用は後で示されるように $\mathbf{P}_2$ または ϕ で記述されることになって，両者がはっきりと分離されるからである．

ポテンシャル ϕ は $\mathbf{P}^2$ の項を通じてハミルトニアン (57.4) に再びあらわれてくる．しかし，$\mathbf{P}_2$ に対する表式と部分積分を利用することによって，この $\mathbf{P}^2$ の体積積分は次のように書き換えられる．

$$\int\mathbf{P}^2d^3r=\int\mathbf{P}_1{}^2d^3r+\int(2\mathbf{P}_1+\mathbf{P}_2)\cdot\mathbf{P}_2d^3r$$

$$=\int\mathbf{P}_1{}^2d^3r+\frac{1}{4\pi c}\int(2\mathbf{P}_1+\mathbf{P}_2)\cdot\nabla\phi d^3r$$

$$=\int\mathbf{P}_1{}^2d^3r-\frac{1}{4\pi c}\int\phi\nabla\cdot(2\mathbf{P}_1+\mathbf{P}_2)d^3r$$

ところで，$\nabla\cdot\mathbf{P}_1=0$ かつ付加条件から $\nabla\cdot\mathbf{P}_2=-\rho/c$；したがって$H$の中の $\mathbf{P}^2$ の項は次のようになる．

$$2\pi c^2\int\mathbf{P}^2d^3r=2\pi c^2\int\mathbf{P}_1{}^2d^3r+\tfrac{1}{2}\int\phi\rho\,d^3r \tag{57.8}$$

ϕ のえらび方から，次の方程式が成立することがわかる．

$$\nabla^2\phi=4\pi c\nabla\cdot\mathbf{P}_2=-4\pi\rho$$

この方程式は (37.19) の自由粒子 Green 関数で $k=0$ とおいたものを使って積分することができる；その結果は

$$\phi(\mathbf{r},t)=\int\frac{\rho(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r' \tag{57.9}$$

となる．

ここで (57.8) および (57.9) を使って (57.4) のハミルトニアンをもう一度書き直せば，次のようになる．

$$H=\int\left\{\frac{1}{2m}\left[\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^*\right]\cdot\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\right]+V\psi^*\psi\right\}d^3r$$

$$+\int\left[2\pi c^2\mathbf{P}_1{}^2+\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2\right]d^3r$$
$$+\frac{1}{2}\iint\frac{\rho(\mathbf{r},t)\rho(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r\,d^3r' \tag{57.10}$$

ただし，$\nabla\cdot\mathbf{P}_1=\nabla\cdot\mathbf{A}=0$ かつ $\rho(\mathbf{r},t)=e\psi^*(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$．(57.10) の最後の項は荷電分布 $\rho(\mathbf{r},t)$ のもつ内部的なクーロンエネルギーである；この項は ϕ および $\mathbf{P}$ の非回転部分を消去した結果としてあらわれたもので，もともと別の仮定として理論にもち込まれるべきものではないのである．

ソレノイド場のベクトル ($\mathbf{P}_1$ および $\mathbf{A}$) は通常，電磁場の**横成分** *transverse part* とよばれているが，それはこれに対応する平面波解中の電場および磁場の強さが §56 の場合と同様に伝播方向に対して横方向をとるからである．非回転的なクーロン場のベクトル ($\mathbf{P}_2$) は場の**縦成分** *longitudinal part* とよばれている．それは (57.9) の方程式からわかるように，ある一点にある無限小の荷電要素から他の一点での $\mathbf{P}_2$ への寄与がこの二点をむすぶ直線に沿っているからである．

57-3 場の量子化

ここまでくれば，互いに相互作用している粒子と電磁場の量子論をつくることができる．それには (54.23) の運動方程式，(55.6) または (55.18) の粒子の交換関係ないしは反交換関係，それに (56.21) で $\mathbf{P}$ を $\mathbf{P}_1$ で置き換えた電磁場の交換関係を基礎的な関係として採用すればよい．もちろんその他に，ψ および $\psi^\dagger$ のすべての成分は $\mathbf{A}$ および $\mathbf{P}_1$ のすべての成分と可換であると仮定することにする．

(57.10) のハミルトニアン中で ψ^* および ψ のような因子が互いに掛け合わされているが，量子化しない場合には勿論その順序は問題にならない．しかしながら，量子論では $\psi^\dagger$ および ψ は互いに可換でなく，特定の計算結果がこれらの項のハミルトニアン中にあらわれる順序によって変わってくることがある．この節の後半で明らかにされるように，クーロン項の被積分関数で一つの置き換えをする以外にはすべての項をそのままにしておいてハミルトニアンとして都合よいものが得られていることになる．(57.10) で問題になる被積分関数というのは次の項を含んでいる．

$$\rho(\mathbf{r},t)\rho(\mathbf{r}',t)=e^2\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t) \tag{57.11}$$

この項を次の項で置き換えることになる[1]．

$$e^2\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r},t) \tag{57.12}$$

(55.6) および (55.18) を使えば，交換関係ないしは反交換関係のどちらを使用するかに関係なく，(57.11) は (57.12) に次の項を加えたものになる．

$$e^2\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r}',t)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$$

したがって (57.11) から (57.12) に変えるということは元のハミルトニアンから次の量をさしひいておくことと同等であることになる．

$$\frac{e^2}{2}\iint\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r}',t)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r\,d^3r' \tag{57.13}$$

この量は $\psi^\dagger(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$ が零でない限り無限大になることは明らかである；以下に示されているように，このようなことは場の中に粒子が存在しない場合にのみ起こり得るのである．

ハミルトニアン (57.10) を (57.11) に対する (57.12) の置き換えで修正しておけば，(54.23) から量子論的運動方程式が得られる．電磁場の方程式は，$\mathbf{P}$ の代りに $\mathbf{P}_1$ が置き代り，電流の項が (57.5) の第二式と同様な形になる点を除けば §56 で得られたものと一致する．粒子場の方程式は ϕ が

$$e\iint\frac{\psi^\dagger(\mathbf{r}',t)\psi(\mathbf{r}',t)}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r'$$

で置き代っている点を除けば，(44.1) と同一である．なお，その場合 (55.6) または (55.18) および (56.21) の括弧式の時間微分は零になることが証明できる．したがって前に仮定しておいたように，これらの方程式が最初の時刻に成立しているとすれば，あらゆる時刻に成立しているわけである (問題9を見よ)．

57-4 静電場を含めること

これまでのところでは，荷電および電流の密度はすべて ψ 場によって記述される荷電粒子に起因していると仮定してきた．ある静的な荷電分布の効果を取り入れることは容易にできて，それには (44.2) の第三式の右辺に $4\pi\rho_s$ の項を，(44.1) の右辺に $e\phi_s\psi$ の項を付け加えておけばよい．ただし $\nabla^2\phi_s=-4\pi\rho_s$. (57.10) のハミルトニアンに対する影響としては，$\int e\phi_s\psi^*\psi d^3r$ なる項を付け加えるだけでよいということは容易に示され

1) (前頁) (57.11) および (57.12) の H に対する寄与はいづれもエルミチアンであることに注意せよ．

る.

実際上最大の興味ある場合というのは $e\phi_s=-Ze/r$ の場合である．これは原点に固定された原子番号 Z の（質量無限大の）点状の原子核の近傍にある1個の電子に対応している．この静電場を付け加え，(57.12) の修正を施すと，(57.10) のハミルトニアンの量子化された形は次のようになる．

$$H=\int\left\{\frac{1}{2m}\left[\left(i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi^\dagger\right]\cdot\left[\left(-i\hbar\nabla-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\psi\right]+V\psi^\dagger\psi-\frac{Ze^2}{r}\psi^\dagger\psi\right\}d^3r+\int\left[2\pi c^2\mathbf{P}_1{}^2+\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2\right]d^3r+\frac{e^2}{2}\iint\frac{\psi^\dagger\psi^{\dagger\prime}\psi'\psi}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}d^3r\,d^3r' \qquad (57.14)$$

ただし，最後の項の添字ダッシュは，その引数が $\mathbf{r}$ でなくて $\mathbf{r}'$ であることを示すものである．このように，原子核によるクーロン相互作用も特定の V を選ぶのと同じやり方でとり入れられるわけであるが，このことは当然予想されたことでもある．

57-5　粒子間相互作用の摂動論

この節の残りの部分では，(57.14) のハミルトニアンに基づく2つの摂動計算を考察することにしよう．最初は電磁場の横成分（$\mathbf{P}_1$ と $\mathbf{A}$）を無視して，粒子間のクーロン相互作用 [(57.14) の最後の項] を摂動と見なすことにする．その際 V および Z の項を両方とも残しておく必要はなく，§23 や §55 で用いられた記法と合わせるために後者は落しておく．この例で興味があるのは，(57.11) を (57.12) で置き換えることが，古典論からの引き継ぎである各荷電粒子の無限大の静電的自己エネルギーをどのように取り除くことになるかを明らかにしている点にある．この例はまた，荷電粒子間の交換相互作用が粒子のしたがう統計との関わり方を含んで，量子化された場の理論からどのようにして生じるかを明らかにしてくれる．第二の計算例として，単一の荷電粒子の電磁場の横成分との相互作用を考えることにする；この例では粒子は1個しか存在していないから (57.14) の最後の項は寄与しない．

非摂動ハミルトニアンは（$e=0$ としかつ横成分の場を無視して）(55.5) そのものになる．その結果，非摂動状態は N 表示におけるケット $|n_1,n_2,\cdots n_k,\cdots\rangle$ で記述することができる．このことは ψ が (55.11) にしたがって展開されることを意味してい

る．この展開での u_k を（23.2）の固有値 E_k をもつ固有関数になるように選んでおくと，結局この場合のケットはエネルギー固有値 $\sum n_k E_k$ をもつ（55.5）の固有状態になる．計算の目的は（57.14）の最後の項から生じる一次の摂動エネルギーを求めることである．§31 の一般論によればこれは

$$\frac{e^2}{2}\iint\frac{\psi^\dagger\psi^{\dagger\prime}\psi^\prime\psi}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}^\prime|}d^3r\,d^3r^\prime$$
$$=\frac{e^2}{2}\sum_{jklm}a_j{}^\dagger a_k{}^\dagger a_l a_m\iint|\mathbf{r}-\mathbf{r}^\prime|^{-1}u_j{}^*(\mathbf{r})u_k{}^*(\mathbf{r}^\prime)u_l(\mathbf{r}^\prime)u_m(\mathbf{r})d^3r d^3r^\prime \tag{57.15}$$

という量のある非摂動ケットに対する期待値になる．少なくとも 2 個の粒子が存在しない限り，$a_l a_m|n_1, \cdots\rangle=0$ であることは，Einstein-Bose 粒子の場合には（55.15）の第一式から，Fermi-Dirac 粒子の場合には（55.26）の第一式から明らかである．零にならない結果を得るには，対称状態の統計を使うならば $l\neq m$ として $n_l\geq1$ かつ $n_m\geq1$ であること，あるいは $l=m$ ならば $n_l\geq2$ であることが必要である．排他原理を使うならば，第一の場合だけが可能になる．

同じようにして，引き去られる量（57.13）は

$$\frac{e^2}{2}\sum_{kl}a_k{}^\dagger a_l\iint|\mathbf{r}-\mathbf{r}^\prime|^{-1}u_k{}^*(\mathbf{r})u_l(\mathbf{r}^\prime)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}^\prime)d^3r\,d^3r^\prime$$

に等しくなることは明らかである．この和の中で $k=l$ になっている項のすべてに伴ってあらわれる積分は明らかに無限大になる．つまり，すべての k に対して $a_k|n_1, \cdots\rangle=0$ でない限り，すなわちすべての k に対して $n_k=0$ したがって粒子が 1 個も存在しないという場合でない限り，（57.13）はこの系のエネルギーに対して無限大の寄与を与えることになる．この無限大の寄与は 1 個の古典的な点荷電のもつ静電的自己エネルギーに他ならないが，場のハミルトニアンから（57.13）の項を引き去っておくことにすれば，この自己エネルギーは量子論からは除かれるわけである．

57-6 Einstein-Bose 粒子の場合

2 個あるいはそれ以上の Einstein-Bose 粒子に対応するケットについての（57.15）の期待値すなわち対角要素は，そのそれぞれが 1 ないし 2 個の占有状態に関係するいくつかの項の和になる．たとえば，単一の占有状態 k に関係する項は $a_k{}^\dagger a_k{}^\dagger a_k a_k=a_k{}^\dagger(a_k a_k{}^\dagger-1)a_k=N_k{}^2-N_k$ の行列要素を含んでいる．したがって，（57.15）のこの部分の期

待値は

$$\frac{e^2}{2}n_k(n_k-1)\iint|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}|u_k(\mathbf{r})|^2|u_k(\mathbf{r}')|^2d^3r\,d^3r' \tag{57.16}$$

となる．予想通りこれは $n_k=1$ ならば零に等しく，$n_k=2$ ならば体積積分の e^2 倍に等しくなる（なお，問題20を見よ）．

異なった占有状態 k および l に関係する項は，$a_k^\dagger a_l^\dagger a_k a_l$, $a_l^\dagger a_k^\dagger a_k a_l$, $a_k^\dagger a_l^\dagger a_l a_k$ および $a_l^\dagger a_k^\dagger a_l a_k$ というそれぞれが $N_k N_l$ に等しい演算子の行列要素を含んでいる．したがって，(57.15) のこの部分の期待値は

$$e^2 n_k n_l\Big[\iint|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}|u_k(\mathbf{r})|^2|u_l(\mathbf{r}')|^2d^3r\,d^3r'$$
$$+\iint|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}u_k^*(\mathbf{r})u_l^*(\mathbf{r}')u_k(\mathbf{r}')u_l(\mathbf{r})d^3r\,d^3r'\Big] \tag{57.17}$$

となる．$n_k=n_l=1$ の場合には，これは (40.6) の形の対称な2粒子波動関数から期待されるはずのものに他ならない．(41.8) について言われたと同様に，(57.17) の第一項は直接的またはクーロン・エネルギーとよばれ，第2項は交換エネルギーとよばれている．

57-7 Fermi-Dirac 粒子の場合

2個またはそれ以上の Fermi-Dirac 粒子に対応するケットについての (57.15) の期待値もやはりいくつかの項の和になるが，今度の場合その各項は2個の異なった占有状態 k および l に関係している．(55.19) 式から

$$a_k^\dagger a_l^\dagger a_k a_l=-a_l^\dagger a_k^\dagger a_k a_l=-a_k^\dagger a_l^\dagger a_l a_k=a_l^\dagger a_k^\dagger a_l a_k=-N_k N_l$$

となることがわかる．$n_k=n_l=1$ であるから (57.15) のこの部分の期待値は

$$e^2\Big[\iint|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}|u_k(\mathbf{r})|^2|u_l(\mathbf{r}')|^2d^3r\,d^3r'$$
$$-\iint|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}u_k^*(\mathbf{r})u_l^*(\mathbf{r}')u_k(\mathbf{r}')u_l(\mathbf{r})d^3r\,d^3r'\Big] \tag{57.18}$$

となる．(40.6) の形の反対称な2粒子波動関数から当然予想されるように，(57.18) では直接的なエネルギーと交換エネルギーとは反対の符号をとっている．

57-8 輻射の理論

最後の例として，次に1個の荷電粒子による電磁的な輻射の吸収および放出が量子場の

理論からどのようにして求められるかを示すことにする．計算の結果は §44 と §45 の半古典的な理論から求められた主要な結果を再現するものであるが，同時にそれらにより健全な基礎を与えることになる．(44.13) のときと同様に，ハミルトニアンを非摂動部分 H_0 と摂動 H' とにわける．このときの H_0 は粒子のハミルトニアン (55.5) と電磁場の横成分のハミルトニアン (56.7) との和になっており，N表示を使えば次のようにも書くことができる．:

$$H_0=\int\left[\frac{\hbar^2}{2m}\nabla\psi^\dagger\cdot\nabla\psi+V\psi^\dagger\psi+2\pi c^2\mathbf{P}_1{}^2+\frac{1}{8\pi}(\nabla\times\mathbf{A})^2\right]d^3r$$
$$=\sum_l N_lE_l+\sum_{\mathbf{k}\lambda}\hbar c\mathbf{k}(N_{\mathbf{k}\lambda}+\tfrac{1}{2}) \qquad (57.19)$$

H' は全ハミルトニアン (57.14) の残りの部分であるが，その中のある種の部分は無視することができる．まずVの項はそのままにしてあるのだから，前と同じようにZの項は落すことにする．また粒子間のクーロン相互作用はここではもはや問題にしないのだから，最後の項も落すことにする．さらに，(56.35) 式についての議論から分かるように，ハミルトニアンの中で $\mathbf{A}$ について一次の項は，光量子の消滅および生成の演算子 $a_{\mathbf{k}\lambda}$ および $a_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger$ について一次になっており，これらの演算子はそれぞれ単一の光子の吸収および放出をひき起こす．同じように考えれば，(57.14) 中の $\mathbf{A}^2$ の項は1対の光子の吸収と放出，1個の光子の吸収ともう一つの光子の同時の放出を生じる．そこで H' の中で $\mathbf{A}$ について一次の部分だけを残しておくことにする．1回部分積分を行なって $\nabla\mathbf{A}=0$ という事実を使えば，この種の項として次のものが得られる．

$$H'=\frac{ie\hbar}{mc}\int\psi^\dagger\mathbf{A}\cdot\nabla\psi d^3r \qquad (57.20)$$

ここでψと$\mathbf{A}$とは時間によって変化するがケットは時間とともに変化しないという Heisenberg 流の見方から，相互作用からの見方へと見方を変えることにする．H' について零次のオーダーでは，ψ や $\mathbf{A}$ したがってまた H' 自身も Heisenberg 流の見方であれ相互作用からの見方であれ同一である．ただしケットの方はすでに時間について厳密には一定でなく，H' の零振動数の部分に比例した永年的変化を示すことになる (§35 および 37 を参照のこと)．その意味で，H' を時間についてのその変化が直接眼にみえるような形に書いておくことにする．(55.11) 式と問題5の解から $\psi=\sum a_l e^{-iE_lt/\hbar}u_l(\mathbf{r})$ であることが導かれる．ただし，ここの a_l はその引数 t が零のところでの値であることの指示は省略してある．そうすればこの式と (56.35) の展開式とを

(57.20) に代入してやって次の結果が得られる.

$$H'=\frac{ie\hbar}{mcL^{3/2}}\sum_{jl}\sum_{\mathbf{k}\lambda}a_j{}^\dagger a_l\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\left[a_{\mathbf{k}\lambda}e^{i(E_j-E_l-\hbar ck)t/\hbar}\int\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})u_j{}^*\nabla u_l d^3r\right.$$
$$\left.+a_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger e^{i(E_j-E_l+\hbar ck)t/\hbar}\int\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})u_j{}^*\nabla u_l d^3r\right] \qquad (57.21)$$

(57.21) で $a_{\mathbf{k}\lambda}$ を含む典型的な項は，エネルギー $\hbar ck=\hbar\omega$ の1個の光子とエネルギー E_l の1個の粒子の消滅，エネルギー E_j の1個の粒子の生成に対応している.；言い方をかえれば，光子1個が吸収されて粒子が状態 l から状態 j へ遷移を行なっているわけである．前に注意しておいたように，ケットは実質的に時間に無関係になっているから，この過程は H' の対応する部分の振動数が実質的に零になる場合すなわち $E_j\approx E_l+\hbar\omega$ の場合にのみ起こる．同様に，$a_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger$ を含む典型的な項は光子1個の放出に対応しており，この過程は $E_j\approx E_l-\hbar\omega$ の場合にのみ起こることになる．このようにエネルギーの保存はこの種の計算の結果として自動的に生じるのである[1].

57-9 吸収に対する遷移確率

まず，1個の粒子が態状 l にあり，ある範囲のエネルギーをもつ光子がいくつかあるようなケット $|\alpha\rangle$ から，粒子が状態 $j(E_j>E_l)$ にあってエネルギーがほぼ E_j-E_l の光子が1個減っているようなケット $|\beta\rangle$ への遷移を考えよう．この遷移に対する H' の行列要素は，(55.15) と (56.34) からわかるように

$$\langle\beta|H'(t)|\alpha\rangle=\langle\beta|T_B|\alpha\rangle e^{i\omega_{\beta\alpha}t} \qquad \omega_{\beta\alpha}=\frac{E_j-E_l-\hbar\omega}{\hbar} \qquad (57.22)$$

となる．ただし，一次のオーダでのつまり Born 近似で T 行列要素を

$$\langle\beta|T_B|\alpha\rangle\equiv\frac{ie\hbar}{mcL^{3/2}}\left(\frac{2\pi\hbar cn_{\mathbf{k}\lambda}}{k}\right)^{\frac{1}{2}}\int u_j{}^*\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\varepsilon_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\nabla u_l d^3r \qquad (57.23)$$

と定義することによって時間によって変化する部分を分離してしまってある．この式の $n_{\mathbf{k}\lambda}$ は始めのケット $|\alpha\rangle$ に存在している吸収されるべきタイプの光子の個数である．そうすれば単位時間当りの遷移確率は §35 および §37 におけると同様に計算することができて次のようになる.

---

1) ここの議論では粒子はボソンであると仮定されてはいるが，粒子がフェルミオンであっても同じ結果が得られることは明らかである．存在しているのが1個の粒子である限り，粒子の統計は重大な意味をもちえない.

$$w=\frac{1}{t}\sum_{\mathbf{k}\lambda}\hbar^{-2}\left|\int_0^t\langle\beta|H'(t')|\alpha\rangle dt'\right|^2$$

$$=\sum_{\mathbf{k}\lambda}\hbar^{-2}|\langle\beta|T_B|\alpha\rangle|^2\frac{1}{t}\left|\int_0^t e^{i\omega_{\beta\alpha}t'}dt'\right|^2$$

$$=\sum_{\mathbf{k}\lambda}\hbar^{-2}|\langle\beta|T_B|\alpha\rangle|^2\frac{4\sin^2\frac{1}{2}\omega_{\beta\alpha}t}{\omega_{\beta\alpha}{}^2t} \tag{57.24}$$

§44 のときと同様に，ここで粒子の状態 j および l は離散的でかつ入射する輻射は無限小の振動数領域 $d\omega$ に対してのある強度分布 $I(\omega)d\omega$ によって記述することができるものと考えておく．そうすれば，輻射場の状態 $\mathbf{k}$ についての和は k または $\omega_{\beta\alpha}$ についての積分で置き換えることができる．それぞれの光子は，エネルギー密度に対しては $\hbar\omega/L^3$ の大きさだけの，つまり強度に対しては $\hbar c\omega/L^3$ の大きさだけの寄与をする．したがって

$$\sum_{\mathbf{k}\lambda}\{\quad\}n_{\mathbf{k}\lambda}\longrightarrow\sum_{\lambda}\int\{\quad\}\frac{L^3I(\omega)d\omega}{\hbar c\omega} \tag{57.25}$$

というように置き換えることができる．(57.23) から (57.25) までの関係を組み合わせるとともに，$d\omega$ に対して $d\omega_{\beta\alpha}$ で置き換えてやることによれば，ある特定の偏り λ に対する遷移確率は

$$w=\frac{8\pi e^2}{m^2c}\left|\int u_j^*\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\nabla u_l d^3r\right|^2\int\frac{I(\omega)\sin^2\frac{1}{2}\omega_{\beta\alpha}t}{\omega^2\omega_{\beta\alpha}{}^2t}d\omega_{\beta\alpha}$$

となる．この $\omega_{\beta\alpha}$ についての被積分項は $\omega_{\beta\alpha}=0$ で鋭いピークを示しており，したがって §35 のときのように考えてゆけば積分の上下限は $\pm\infty$ にまで延長され，さらに $\int_{-\infty}^{\infty}x^{-2}\sin^2 xdx=\pi$ という結果を使えば

$$w=\frac{4\pi e^2I(\omega)}{m^2c\omega^2}\left|\int u_j^*\exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\nabla u_l d^3r\right|^2$$

$$\omega=\frac{E_j-E_l}{\hbar} \tag{57.26}$$

となる．この結果は (44.17) 式と一致している．

57-10 放出に対する遷移確率

次には (57.21) の $a_{\mathbf{k}\lambda}{}^\dagger$ の部分を使って 1 個の光子の放出に対する遷移確率を計算しよう．計算の結果を §§57-9 で得られた結果と比較し易いようにするために，ここでもやはり $E_j>E_l$ として，消滅される粒子は状態 j に，生成される粒子は状態 l にあるもの

と考えておく．この場合には（57.23）のT行列要素は次式で置き換えられる．

$$\frac{ie\hbar}{mcL^{3/2}}\left[\frac{2\pi\hbar c(n_{\mathbf{k}\lambda}+1)}{k}\right]^{\frac{1}{2}}\int u_l^* \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\nabla u_j d^3r \qquad (57.27)$$

この際（53.34）の第2式を利用してあるが，ここの $n_{\mathbf{k}\lambda}$ は始めに存在している放出されるべきタイプの光子の個数であることを思い出しておくことは重要である．（57.23）から（57.26）に到達するまでの計算と同様な計算によって，単位時間当りの放出の確率として次の表式が得られる．

$$\frac{4\pi e^2 I(\omega)}{m^2 c\omega^2}\left|\int u_l^* \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\nabla u_j d^3r\right|^2$$
$$+\sum_{\mathbf{k}}\frac{8\pi e^2\hbar}{m^2\omega L^3}\left|\int u_l^* \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\nabla u_j d^3r\right|^2\frac{\sin^2\frac{1}{2}\omega_{\beta\alpha}t}{\omega_{\beta\alpha}{}^2 t} \qquad (57.28)$$

ただし $\omega_{\beta\alpha}$ はここでもやはり（57.22）で与えられる．

（57.28）の二つの項は明らかに（57.27）の $(n_{\mathbf{k}\lambda}+1)^{\frac{1}{2}}$ という因子の中の $n_{\mathbf{k}\lambda}$ と1からそれぞれ生じてきている．第1項は入射する輻射の強さに比例しており，誘導放出の確率に対する（44.19）の表式と一致している．第2項は始めに存在する輻射の強さには無関係になっている；この項は §45 で求められた自然放出の確率と一致することを次に示すことにしよう．

$\mathbf{k}$ についての和を ω あるいは $\omega_{\beta\alpha}$ についての積分に置き換えることによって（57.28）の第2項を簡単にすることができる．このためには，その角振動数が ω から $\omega+d\omega$ の領域にある電磁場の状態の個数に対する表式が必要になる．§11 での周期的な境界条件についての議論から導かれるように，その伝播ベクトルを $dk_x dk_y dk_z$ の領域にもつ平面波は $(L/2\pi)^3 dk_x dk_y dk_z$ だけある．したがって，もしもこの伝播ベクトル $\mathbf{k}$ の方向をある固定された一組の基準軸に関する極角座標 θ, ϕ で指定することにすれば，伝播方向が $d\theta d\phi$ という角の領域になっている平面波で角振動数が $d\omega$ の範囲内にあるものの個数は

$$(L^3\omega^3/8\pi^3c^3)\sin\theta d\theta d\phi d\omega$$

となる．そこで（57.28）の第2項での ω についての積分は前と同様に実行することができて，その結果は次のようになる．

$$\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi}\sum_{\lambda}\frac{e^2\hbar\omega}{2\pi m^2c^3}\left|\int u_l^* \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\nabla u_j d^3r\right|^2\sin\theta d\theta d\phi \quad (57.29)$$

(57.29) で和の記号の右手にきている表式は角についての領域 $d\theta d\phi$ 内に伝播ベクトル $\mathbf{k}$ をもち，かつ偏りが λ の光量子1個の自然放出に対する単位時間当りの確率である．つまり，(57.29) は $j\rightarrow l$ の遷移に伴う自然放出の全確率になっている．この確率を §45 のこれに対応する表式と比較するために，話を双極子の場合に限定する，つまり行列要素の被積分項で $\exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r})$ を1で，∇ を $-(m\omega/\hbar)\mathbf{r}$ で置き換えることにすれば [(44.20) 式を見よ],

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\sum_\lambda\frac{e^2\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\left|\boldsymbol{\varepsilon}_{\mathbf{k}\lambda}\cdot\int u_l{}^*\mathbf{r}u_jd^3r\right|^2\sin\theta d\theta d\phi \tag{57.30}$$

となる．それぞれの伝播ベクトルに対する2個の偏りの方向は，互いに直交しかつ $\mathbf{k}$ に対して垂直になっていさえすれば任意に選ぶことができる．その一つを $\mathbf{k}$ と行列要素 $\langle l|\mathbf{r}|j\rangle$ の平面内に選び，他の一つをこの平面に垂直に選んでおくと，前者の偏りのものだけが放出される；その際被積分項中には，θ を $\mathbf{k}$ と $\langle l|\mathbf{r}|j\rangle$ との間の角として $\sin^2\theta$ という因子が現われる．要するに，放出される輻射の偏りと角分布は §45 で求められたものと一致するわけである．実際に (57.30) から求められる自然双極子放出の全確率は

$$\int_0^\pi\int_0^{2\pi}\frac{c^2\omega^3}{2\pi\hbar c^3}\sin^2\theta\left(\int u_l{}^*\mathbf{r}u_jd^3r\right)\cdot\left(\int u_l{}^*\mathbf{r}u_jd^3r\right)\sin\theta d\theta d\phi$$

$$=\frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3}|\langle l|\mathbf{r}|j\rangle|^2 \tag{57.31}$$

となり，これは (45.22) と一致している．

自然放出と誘導放出の確率は，量子場の理論ではいずれも単一の計算の結果として現われるのに対し，第XI章ではこれら2種の効果は全く異なったやり方で計算された．上で指摘しておいたように，自然放出の方は (56.34) 式の第2項に現われる $(n_{\mathbf{k}\lambda}+1)^{\frac{1}{2}}$ という因子中の1から生じている．この因子は一方ではまた (56.28) の交換関係に由来しており，したがって一つの純粋に量子力学的な効果なのである．形式的な見地からすれば，自然放出の確率は電磁場の各々の状態に1個の量子が存在することによって誘導されるはずの放出の確率に等しいと言ってもよい（なお，第XI章の問題6をも見よ）．ところで，(56.32) 式について説明しておいたように，場として可能な最小のエネルギーは，各状態当りに半分の量子が存在していることに対応していた．このことは自然放出の過程が電磁場の零点振動によって誘起されるものと見なされることを示唆している．；ただし，この種の振動は，放出を伴う遷移をつくり出すのには現実の光子に比べ

て2倍に有効になっており，当然のことながら吸収を伴う遷移をつくり出すことは不可能なのである．

問　　題

1. (54.12) から (54.14) までの関係を使って，ある場に対する古典論でのハミルトンの運動方程式は細胞近似でのラグランジ方程式と一致することを証明せよ．
2. (54.20) 式は，たとえ汎関数密度 F が ψ および π ばかりでなく，$\nabla\psi$ や $\nabla\pi$ を含む場合にもやはり成立することを証明せよ．
3. 波動場の振幅 $\psi(\mathbf{r}_0, t)$ はそれに対応する汎関数密度が $\psi(\mathbf{r}, t)\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)$ になっている一つの汎関数と見なすことができ，π に対しても同様なことが言える．これらの汎関数密度を使うと (54.20) 式は ψ および π に対する正しい運動方程式になっていることを証明せよ．
4. (55.11) およびそれにつづく方程式を u_k が関数の連続的な組をつくっている場合に拡張せよ．次に，第Ⅲ章の問題2を利用して，任意の点の無限小近傍で測定される粒子の個数はある正整数あるいは零になることを証明せよ．
5. Hが (55.17) の形をもつとき，(55.11) で定義されている Heisenberg 流の見方での演算子 $a_k(t)$ の運動方程式を求めよ．また，この方程式を積分して $a_k(t)$ を $a_k(0)$ によって表わせ．
6. 反交換子括弧は交換子括弧および Poisson 括弧とは異なった代数的性質をもつことを示せ．
7. 非相対論的な Fermi-Dirac 粒子に対してはNは運動の恒量になることを証明せよ．
8. Fermi-Dirac 粒子の系で2個の状態が存在するものを考える．この系について (55.23) および (55.24) に類似の行列およびケットを具体的な形で求めよ．
9. 非相対論的な Schrödinger 方程式の二様の量子化のいづれに対しても $[\rho(\mathbf{r}, t), \rho(\mathbf{r}', t)]=0$ になることを証明せよ．ただし，$\rho(\mathbf{r}, t)\equiv e\psi^\dagger(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)$．
10. $[\nabla\times\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)]^2$ と $P_x(\mathbf{r}', t)$ との交換子括弧を計算し，その結果を使って真空中の電磁場における量 $\mathbf{P}$ に対する運動方程式が (56.6) の第2式で与えられることを証明せよ．
11. もしも $\mathbf{A}$ および $\mathbf{P}$ の二つの直交成分の間の交換子括弧が

$$[A_s(\mathbf{r}, t), P_{s'}(\mathbf{r}', t)]=i\hbar\delta_{ss'}\delta^3(\mathbf{r}-\mathbf{r}')-\frac{i\hbar}{4\pi}\frac{\partial}{\partial r_s}\frac{\partial}{\partial r'_{s'}}\left(\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}\right)$$

　　で与えられるとすれば，この場合異なった空間点での $\mathbf{A}$ および $\nabla\cdot\mathbf{P}$ はお互いに可換であることを証明せよ．
12. (56.8) の交換関係の最後のものを問題11 の関係で置き換えても場の強さに関係しているような交換関係には影響しないことを示せ．
13. $\nabla\cdot\mathbf{H}$ は電磁場のハミルトニアン (56.15) と可換であり，したがって運動の恒量になっていることを証明せよ．
14. (56.16) の各段階の計算を実行して，Maxwell 方程式の最初の二つの方程式が得られていることを示せ．
15. (56.18) の括弧式のそれぞれと (56.22) のハミルトニアンとの間の交換子括弧を計算し，それぞれの括弧式が時間について一定になっていることを示せ．この結果は，これらの交換法則が

運動方程式と両立しうるものであることを意味している.

16. $\mathsf{E}_x(\mathbf{r}, t)$ と $\mathsf{H}_y(\mathbf{r}', t')$ との交換子括弧に対する (56. 43) の表式を導け.

17. (57. 3) 式から, $\psi, \psi^*, \mathbf{A}$ および ϕ に対するラグランジの運動方程式を求めよ.

18. ハミルトニアンが (57. 11) を (57. 12) で置き換えたときの (57. 10) で与えられているとして, ψ に対する量子論的な運動方程式を求めよ. ϕ を $e\int|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^{-1}\psi^\dagger(\mathbf{r}', t)\psi(\mathbf{r}', t)d^3r'$ で置き換えた場合には, この方程式は (44. 1) と一致することを証明せよ. もしも上のような置き換えが行なわれないとすれば, どのような結果が得られるか?.

19. (55. 6) または (55. 18) の括弧式および (56. 21) のそれは, 問題18 のハミルトニアンに対しては時間について一定になっていることを証明せよ.

20. (57. 16) の表式は, 同一の状態 k に n_k 個の Einstein-Bose 粒子が存在するとした場合の §40 の議論から, n_k の任意の値に対して得られることを証明せよ.

人 名 索 引

事項索引

ア

サ

マ

ヤ

ラ

ワ

あ　と　が　き

量子力学の教科書
参　考　書

今日，量子力学は物質の原子的過程についての基礎的な理論として極めて多面的な役割を果たしている．今世紀初頭プランクの「エネルギー量子」，アインシュタインの「光量子」の導入につづく1910年代のラザフォードの有核原子模型の確立，ボーア，ゾンマフェルト，ボルン等を中心とする原子構造理論いわゆる前期量子論の発展等，多数の研究者の実験・理論の分野にわたる悪戦苦斗の結果，1920年代に至ってハイゼンベルク，ド・ブロイ，シュレーディンガー，ディラック等の新鋭の手によって合理的量子論すなわち量子力学が建設された．量子力学の形成は原子的現象が新しい自然法則の支配をうける新しい自然の一階層であることを明らかにするとともに，ニュートン力学を典型として築かれてきた前世紀の機械論的な自然観の根底を揺がし，今世紀の思想的相貌を決定づける指標的な事件とみなされている．さらに1930年代におよんでようやく数学的形式としても整備され，正統的な解釈も確立した量子力学は，一方では原子核の構造・反応の問題に適用されて成功を収めるとともに，他方では中間子理論の登場に象徴されるように，素粒子を含む極微の世界の高エネルギー現象の問題は量子力学の適用限界を意識せしめた．この彼岸の現象を支配する新たな理論の形成は，今日の物理学の重要な課題の一つになっている．現在「素粒子論」の形成に指向されている前衛的な努力は「相対論的量子力学」または「場の量子論」の定式化を不可欠の階梯とするとともに，量子力学の基礎概念に対する批判の活潑化を招きつつある．

周知のごとく，低エネルギー核現象は現在では量子力学の適用可能性の確立された分野とみなされ，さらに原子炉の開発・利用等の「原子核工学」の諸技術への広範囲な応用が精力的に行なわれている．同時に原子・分子の構造・反応論の基礎としての量子力学は伝統的な化学の理論的な全分野をも掩っており，「統計力学」と併用されて固体・液体・気体の巨視的な性質を原子論的に理解する鍵を提供するばかりでなく，新しい材料物質の開発を目指す「分子工学」の基礎となっている．この種のいわゆる「物性理論」的分野は量子力学の単なる応用としてのみでなく，最近めざましい進歩を見せている

「量子統計力学」と相まって，基礎理論としてなお多くの魅力のある問題をはらんでおり，さらに生命現象のごとき未開拓の分野をも対象に含むことによって「生物物理学」「分子生物学」の領域への一つの基地となりつつある．

量子力学の果しているこのような多様な役割――素粒子論への前進基地としての役割，物性論的応用の基礎としての役割，新しい自然観の根抵としての思想的役割――からみて，量子力学が広汎な層の人々から多岐多様な関心が寄せられてきていることは故なしとしない．その意味でまた，量子力学に関する著作には多種多様なものがみられる．量子力学を学ぶに当っては，これらのどの方向に重点をおくかによって，書物の選択に適当な配慮がなされるべきであろうが，いずれにせよ瑣末な点にとらわれることなく，まず量子力学の基本的な形式を把握することが第一であろう．本書の程度の内容の理解はいずれの目的に対してし最大公約数的なものと思われる．本書の内容に直接関係する参考文献は，本文中にかなり親切に引用されており，邦訳のあるものは示しておいた．以下では，上述のような一般的な観点から，比較的入手しやすい日本語のものを主とした参考書，教科書の類をおげておくことにする（本文中にすでに引用されているものも重複してあげてある）．

まず本書と同程度のもので標準的な教科書としては次のものがあげられる．

1）湯　川　秀　樹　「量子力学序説」　（弘　文　堂）
2）朝 永 振 一 郎　「量 子 力 学」Ⅰ・Ⅱ　（みすず書房）
3）ボーム 高林・河辺・後藤・井上共訳「量　子　論」　（みすず書房）
4）ブロヒンツェフ 石橋・中山 共訳　「量 子 力 学」（全2巻）　（東 京 図 書）

1）は中間子論の創始者による標準的な教科書であるが初版はかなり古く1947年で，1954年の版からは電子の相対論的理論の項が補われ，手頃な大きさに体系的な内容を盛った教科書になっている．（1971年に同じ内容のものが新装版として複刊されている．）2）は量子電磁力学等の分野で先駆的な研究を行なった著者の手によって1）に比してずっとゆったりとした形式で，極めて懇切な説明がなされており，じっくりと勉強する人には好適であろう．3）の原著は1951年の刊行で，著者は多体問題の取扱いに優れた仕事をし，最近は量子力学の因果的解釈に関して一連の研究を行ない，正統的解釈に対して一石を投じた，極めて個性の強い人である．3）には量子論の解釈についての著者の立場は露わにはされていないが，最後の一章が観測過程の量子論に当てられており，

正統的な立場からの稍々詳しい解説がみられる他，随所に興味ある説明がみられる．4）の著者は，ソ連の理論物理界でのヴェテランで，素粒子論，量子力学の基礎的・批判的研究で著名である．量子的アンサンブルによる量子力学の基礎付けという著書の立場は，国立モスコー大学での講義に基づくこの著書では必ずしも露骨ではなく，むしろ古典論との対応を明らかに丁寧な説明が特色であるといえよう．

シッフの本書は，第三版でかなりの実質的な改訂をへて内容的には最も up-to-date になっている．ただし，骨組の構成，議論のすすめ方の点ではシッフと1）および4)，2）と3）の間に類似的な傾向がみられ，あい補っているのは興味深い．シッフもボームもともにその著書の序文でカリフォルニア大学時代におけるオッペンハイマー教授の講義および指導の影響について記しているのは，オッペンハイマーその人の多角的な指導精神を偲ばせている．オッペンハイマーは啓蒙的著書の中で量子力学の参考書として推奨しうるものとして，シッフの本書以外に次の5，6）をあげてなかんずく，シッフのものがもっとも初等的であると付言している．

5）ディラック 朝永他共訳 「量子力学」(第4版) (岩波書店)
6）パウリ (W. Pauli) “*Die Allgemeinen Prinzipien der Wellenmechanik*” (Springer)
7）メシア 小出・田村 共訳 「量子力学」(全3巻) (東京図書)

確かに5)，6)，7）はともに研究論文にもっとも多く引用されている高いスタンダードのもので，量子力学の本格的な勉強には逸することはできない．5）の原著は1929年の初版刊行以来，現在までに四度の改訂をうけている．第二版において本質的な改訂が行なわれて後は，主として場の量子論の部分についての付加的な書き直し，副次的な修正がなされている．5）は旧版の Handbuch der Physik (Springer) の第24巻の一篇として1933年に刊行されたものであるが，1958年刊行の新版の Handbuch der Physik に相対論的理論を述べた第二部を除いて第一部の部分が同じ表題で引用文献や脚注を若干追加した程度で殆どそのままの形でのせられており，「あらゆる新理論に対する最も手剛い検事」として敬愛されつつ最近没した著者の自信の程をうかがわせる．(旧版のリプリント版が最近 Dover 社から刊行されている.) 書き方はかなり荒削りではあっても，確かに量子力学の一般理論が最も透徹したスタイルで述べられている．7）はフランスの理論物理学界の近代派による著書で，フランス版の刊行は1958年，英語版は1965年で最も新しくしたがってスタイルも最もモダーンである．ディラック，パウリの著書

以外に量子力学の創始者による著作としては次のものがある．

8）ハイゼンベルク 玉木他訳　「量子論の物理的基礎」　（みすず書房）
9）ド・ブロイ 渡辺慧訳　「波動力学」　（岩波書店）
10）ド・ブロイ 堀伸夫訳　「新力学における量子化の理論」　（白水社）
11）シュレーディンガー「波動力学論文集」　（共立出版，近刊）
12）ゾンマーフェルド (A. Sommerfeld)　“*Atombau und Spektrallinien,* Bd. II.”　(Friedr. Vieweg)
13）クラマース (H. A. Kramers)　“*The Foundation of Quantum Mechanics*”　(North Holland)

これらはいずれも歴史的・基本的な労作として逸することのできないものであろう．8）は1932年にシカゴ大学で行なった講義を基にしたもので，粒子像と波動像とのシンメトリックな取扱いが一貫してみごとである．そのよい一例としては，シッフの教科書にも取り扱われている霧箱中の飛跡形成の理論をあげることができよう．9）は光学一力学のアナロジーによる物質派のアイディアについて，10）は変換理論についての明晰な解説で，いわゆるフランス的という形容詞にふさわしい．シュレーディガーは波動力学についてのまとまった著作を残していない．11）は波動力学建設の原論文の選集である．彼の議論は必ずしも明快ではないが教育的である．12）は最初前期量子論（Bohr-Sommerfeld の理論）を解説した同名の著者（第一巻）の補説（Ergänzungsband）として刊行されたもので，波動力学に関する最初の最も明快な解説として貢献した．ボーアもシュレーディンガー同様，量子力学についてのまとまった著書を書いていない．13）のクラマースの教科書をボーアの精神を最も忠実に反映したものとしてあげておく．元のドイツ版は*Hand-und Jahrbuch der Chemischen Physik* 中の一巻に，輻射および電子の相対性理論を取扱った第二部とともに発表されたものの第一部にあたる部分の英訳である．原著の刊行されたのは11）が1928年，8），9），12）が1930年，10），13）が1932年である．

量子力学の数学的に厳密な基礎づけは，晩年自動制御機構（人工頭脳）の精力的な研究で有名であった数学者ノイマンによって1930年代に行なわれた．その結果は次の書物に極めて美しい形にまとめられている．

14）ノイマン 井上他訳　「量子力学の数学的基礎」　（みすず書房）

原著の刊行は1932年であるが，今日量子力学解釈に関する論争は，この著作に展開されている量子力学における隠れたパラメーターの存在を否定する，いわゆる「ノイマン証明」をめぐって行なわれる場合が多いが，その他にも非可逆性等に関しての量子統計力

学の基礎的な問題や観測の理論にも立ち入った議論がなされている点でも重要なものになっている.

量子力学の応用の典型的な例は上記のものにも含まれているが，基本的形式の展開とともに，物質構造一般に対する量子力学の応用をも含むもの，あるいは後者にアクセントが置かれているものとしては次のものがあげられる.

15) 武藤俊之助　「量子理論とその応用」I・II・III（共立出版，共立全書）
16) 荒木源太郎　「量子力学」（培風館）
17) モットースネッドン (Mott-Sneddon)　“*Wave Mechanics and its Applications*”（Oxford）
18) スレーター 大森恭輔訳　「物質の量子理論」I・II（共立出版，共立全書）
19) ランダウ-リフシッツ 佐々木・好村共訳　「量子力学—非相対論的理論—」（全2巻）（東京図書）
20) フント 犬井鉄郎訳　「物質構造論」（吉岡書店）
21) ダビドフ 近桂一郎訳　「量子力学」I・II・III（新科学出版）

17)，18) はいわゆる応用量子力学の教科書としては典型的なものである. モット，スレーター，ランダウ，フント等はいずれも量子力学建設の英雄時代の末期に指導者達の周辺にあって理論の展開に協力し，その後それぞれイギリス，アメリカ，ソ連，ドイツの理論物理学界に一学派を形成して指導的な役割を果し，多彩な活動を示した人々である. スレーターの叙述のスタイルは歴史的な推移を含めて，数学的形式化におぼれず発見法的な教育的配慮によって有名である. 19) はランダウの「理論物理学教科」の一冊であるが，全巻極めて圧縮されたしかも透徹した明快さで貫かれており，類書と異なった独創的なスタイルをもっている. 量子力学の古典論的近似がかなり詳しく論じられているのも一つの特色といえよう. フントの著書は明快なダイアグラムを多く用いた直観的説明が特徴であるとともに，ハイゼンベルクとともに在った1930年代のライプチッヒの学風を伝えている. 21) の著者は励起子や原子核の変形モデルの研究で著名なソ連のキエフ研究所のメンバーで，ソ連の教科書一般に共通な少々泥臭いまでに丁寧な叙述になっている. この本の最後には場の量子論の方法による粒子系の取扱いが含まれており，その点では最もモダーンといえる.

原子・分子の構造および反応性の理論，つまり化学の基礎理論としての量子力学の展開を主題としたものは量子化学という表題をもつことが多い. この種のものは極めて多数あるが，その中のいくつかをあげておこう.

22) 水島・長倉共著　「量子化学」（改稿版）（岩波書店，岩波全書）

23）米沢ほか共著 「改訂 量子化学入門」（上・下） （化学同人）
24）福井謙一 「量子化学」 （朝倉書店）
25）ポーリング・ウイルソン 玉木ほか共訳「量子力学序論」 （白水社）
26）アイリング・ワルター，キンボール 小谷・冨田共訳「量子化学」 （山口書店）
27）ドーデル 大鹿ほか共訳 「量子化学」（上・下） （吉岡書店）

22）はわが国でのこの分野で先駆的研究を行なった著者による簡潔な入門書．23），24）には有機量子力学の分野を含むその後の発展が示されている．25）は古く1935年に出版されたもので取扱いは初等的であるが，今なお生命のある名著で一般的な教科書としても推奨しうる．アイリングはポラニイとともに化学反応の量子論における先駆的研究で知られ，アメリカにおける理論化学の一中心をなした．化学結合・原子および分子スペクトル・化学反応等の個々の問題についての参考書として代表的なものに次のものがある．

28）ポーリング 小泉正夫訳 「化学結合論入門」 （共立出版）
29）ポーリング 小泉正夫訳 「化学結合論」（改訂版） （共立出版）
30）クールソン 関ほか共訳 「化学結合論」（第2版） （岩波書店）
31）ヘルツベルク 堀健夫訳 「原子スペクトルと原子構造」 （丸善）
32）コンドン・ショートレイ (Condon-Shortley) “*The Theory of Atomic Spectra*” (Cambridge Univ. Press)
33）ヘルツベルク (G. Herzberg) “*Molecular Spectra and Molecular Structure*” (Van Nostrand)
34）アイリング 平井・長谷川共訳 「絶対反応速度論」（上・下） （吉岡書店）
35）アイリング・アイリング 長谷川・平井共訳「反応速度論」 （共立出版）
36）レイドラー 高石哲男訳 「化学反応速度論」（Ｉ・Ⅱ） （産業図書）

29）の初版は1939年に刊行され，その後たびたび改訂された．28）は29）の縮小版として編まれたものである．32）は1935年に刊行されたが，現在でもこの分野における標準的なものとして引用されている．

多粒子系としての原子・分子・結晶等の力学系の量子力学的取扱いに当って有効な方法として古くから用いられているものに群論的方法があり，モダーンなそれとしては21）に関連して触れた場の量子論の手法の応用がある．前者の類は最近数多く出版されているが，次のものはこの種のものとして古典的地位を占めている．

37）ファン・デル・ウェルデン (Van der Waerden) “*Die gruppentheoretische Methode in der Quantenmechanik*” (Springer)
38）ワイル 山内恭彦訳 「群論と量子力学」 （裳華房）

39) ウィグナー 森田・森田 共訳 「群論と量子力学」 (吉岡書店)

14) の著者フォンノイマンと共にファン・デル・ウェルデンもワイルもともに数学者であるが，これらの著者は量子力学の発展期におけるベルリン・ゲッチンゲン・ライプチッヒでの数学と物理学の交流の雰囲気の所産ともいえる．同時に 37)，38)は群疫 (Gruppenpest) 流行の源ともなった．38) には量子力学の代数構造についてのワイルの興味のある見解が随所に見られる．37)，38) の原著の出版はそれぞれ1932年，1931年である．39) も最初ドイツ版として1931年に刊行されたが，1959年の英語版で増補改訂され up-to-date になった．39) は英語版の翻訳であり，シッフの第三版での増補された第7章の内容を補うものである．第7章の説明を直接補うものとして次のものも便利である．

40) ローズ 山内・森田 共訳 「角運動量の基礎理論」 (みすず書房)

古典統計力学は量子力学の確率概念の故郷である．また同時に多粒子系を含んで巨視的物体の性質の量子力学的理論，いわゆる物性物理学的応用に当っては，古典的な気体運動論以来の統計力学的方法が不可欠である．原子的過程を基礎とする限り，それは量子力学的状態概念を用いた量子統計力学的方法である．この種の方法は最近技術的に発展整備されてきているが，ここでは初等的あるいは基礎的なものを主としてあげておく．

41) 久保亮五 「統計力学」(改訂版) (共立出版，共立全書)
42) 中村 伝 「統計力学」 (岩波書店，岩波全書)
43) 伏見康治編 「量子統計力学」 (共立出版)
44) 桂 重俊 「統計力学」 (広川書店)
45) ガーネイ 山本常信 訳 「統計力学序論」 (吉岡書店)
46) テル・ハール 田中ほか共訳 「熱統計学」(I・II) (みすず書房)
47) ランダウ・リフシッツ 小林ほか共訳 「統計物理学」(第2版) (上・下) (岩波書店)
48) ワンニアー (G. H. Wannier) “*Statistical Physics*” (J. Wiley)

41)〜45)は手頃な分量の中での基礎的事項の要領のよい概説で，特に45) は初等的である．46) はローレンツ，エーレンフェスト・クラマース等のオランダ学派の学風を反映した著者で，基礎論と特殊な応用を含む．47，48)はそれぞれ特色のある著書になっている．場の量子論の方法による多体問題の取扱いの初等的な取扱いないしはやや進んだものとして次のものがある．

49) サウレス 松原・米沢共訳　「多体系の量子力学」　(吉岡書店)
50) 沢田克郎　「多体問題」　(岩波書店)
51) アブリュソフほか 松原ほか共訳　「統計物理学における場の量子論の方法」　(東京図書)

量子力学的な物性物理学は固体物理学を中心にして，基礎論的にもまた技術的応用の面においても著しい発展をとげた分野であり多様な著作がなされている．

52) 久保・永宮編　「固体物理の歩み」　(岩波書店)
53) 永宮・久保編　「固体物理学」(第2版)　(岩波書店)
54) キッテル 山下次郎訳　「固体物理学入門」(上・下)　(丸善)
55) ザイマン 山下・長谷川共訳　「固体物性論の基礎」　(丸善)
56) パイエルス 碓井ほか訳　「固体の量子論」　(吉岡書店)
57) ショックレイ 川村肇訳　「半導体物理学」(上・下)　(吉岡書店)

電磁気的物性ないしは電離流体（プラズマ）を主題にするものとしては次のようなものがある．

58) 金森順次郎　「磁　　性」　(培風館)
59) 近角聡信　「強磁性体の物理」　(裳華房)
60) ヴァン・ブレック 小谷・神戸共訳　「物質の電気分極と磁性」　(吉岡書店)
61) スリクター 益田・雑賀共訳　「磁気共鳴の原理」　(岩波書店)
62) シュピッツァー 山本ほか共訳　「完全電離気体の物理」　(コロナ社)
63) 後藤憲一　「プラズマ物理学」　(共立出版)

61）は物性研究のミクロな手段として最近広く用いられている磁気共鳴現象の丁寧な解説である．

原子核・高エネルギー現象・素粒子に関する初等的，基礎的なものとしては次のものがある．

64) モット・マッセイ 高柳和夫訳　「衝突の理論」(上・下)　(吉岡書店)
65) ダルファロ・レッジュ 原康夫訳　「ポテンシャル散乱論」　(講談社)
66) ワトソン・ゴールドバーガー (Watson-Goldberger)　"*Collision Theory*"　(J. Wiley)
67) ランダウ・スモロディンスキー 高木・天井共訳　「原子核理論」　(吉岡書店)
68) フェルミ 小林ほか共訳　「原子核物理学」　(吉岡書店)
69) 小田稔　「宇宙線—高エネルギー粒子の物理学—」(改訂版)　(裳華房)

70) 揚振寧 林一訳 「素粒子の発見」 (みすず書房)
71) フェルミ 村田良夫訳 「素 粒 子」 (東京図書)
72) セグレ 眞田・三雲共訳 「原子核と素粒子」(上・下) (吉岡書店)
73) 武田・宮沢共著 「素粒子物理学」 (裳華房)
74) 川口正昭 「素粒子論」 (共立出版，共立全書)
75) 武谷三男編 「宇宙線研究」 (岩波書店)
76) 武谷・坂田・中村共編「素粒子の本質」 (岩波書店)
77) 瀬川・坂田・武谷共編「素粒子の探究」 (勁草書房)

64）はこの分野で定評があり，原書は改訂第3版（1965）が出ているが，翻訳は第2版（1962）によっている．衝突現象の取扱いはシッフの本書の第3版においてもかなり増補された部分であるが，改訂という制限のためにかなり簡潔な叙述になっている．65)，66）はその点について補足するものである．70）は一般向の講演に基づく読物である．71）も講演に基づくもので極めて初等的な取扱いに終始しているが，67）とともに巨匠の手による初等的解説として一読に値する．72）は極めて教育的で参考書としてよい．75)，76)，77）はやや特殊ではあるが，75)，76）には宇宙線・素粒子の分野におけるわが国の研究の現状についての展望と回顧が収録されており，77）は中間子論30周年を記念して刊行された，わが国の素粒子論グループの歴史的発展の記録である．

理論物理学・現代物理学または原子物理学に関する通論ないしは概論の類で，量子力学の前景としての古典物理学や実験的背景を知るのに便利なものとして次のものがある．

78) スレーター 井上健訳 「理論物理学入門」(上・下) (岩波書店)
79) ボルン 鈴木・金岡共訳 「現代物理学」 (みすず書房)
80) スレーター 石黒ほか共訳 「現代物理学」 (好学社)
81) シュポルスキー 玉木英彦訳 「原子物理学」(Ⅰ・Ⅱ・Ⅲ) (東京図書)
82) カンパニエーツ 山内・高見共訳 「理論物理学」 (岩波書店)
83) レートン 斉藤ほか共訳 「現代物理学概論」 (岩波書店)
84) 富山小太郎 「現代物理学の論理」 (岩波書店)

78)，79）の原著の刊行は古いがともに長い生命をもっている．80）は 78）に対して原子物理学のコンサイスな歴史的発展が盛られている．81)，82）はともにソ連の教科書らしく親切丁寧で独習には都合がよい．83）は原子・分子・原子核・素粒子の分野に

わたって内容としては最も新しい．

古典物理学から現代物理学にわたって一定のプログラムの下で個人またはグループによって編まれた「講義録」または「教程」の類の中には量子力学の教科書として優れたものも少なくなく，また古典理論との有機的連関があって便利である．その種のものとして次のものがある．

85）ゾンマーフェルト「理論物理学講座（全6巻）（講談社）

86）ランダウ・リフシッツ「理論物理学教程」（全9巻）（東京図書）

87）ファインマン・レイトン・サンズ「ファインマン物理学」（全5巻）（岩波書店）

88）キッテルほか共編「バークレー物理学コース」（全5巻）（丸善）

85）には量子力学の部分は含まれていない．12）がそれに当っている．なお，85）の第六巻“物理学における偏微分方程式”は物理数学の名著として有名である．

これまであげたものは理論的でかつ一般的な内容のものが殆どであるが，特殊な問題とか実験的・応用的な事項についての知識も極めて必要である．それらの点についてもちろん個々の成書が利用されるべきであるが，講座類を利用するのも便利であろう．比較的新しいものをあげれば次のようなものがある．

89）「岩波講座現代物理学」(改訂版)（全14巻）（岩波書店）

90）「物性物理学講座」（全12巻）（共立出版）

91）「分子科学講座」（全10巻）（共立出版）

92）「核物理学講座」（全13巻）（共立出版）

93）「岩波講座現代物理学の基礎」（全12巻）（岩波書店）

量子力学の理論形式の解釈に当って中心的な役割をする相補性原理とか不確定性原理とかは，20世紀の思想を特徴づけるものとして一般的な文脈の中で引用または援用されることが多い．これらの概念は量子力学の理論の数学的形式の全面的な解釈を背景にして用いられないときにはしばしば誤用ないしは拡大解釈の危険がある．しかし多くの場合，量子力学の建設・発展に貢献した人々の一般的・思想的な内容の著書が典拠されることが多い．この種のものとして次のものがある．

94）ローゼンタール編 豊田利幸訳「ニールス・ボーア」（岩波書店）

95）湯川秀樹監修「アインシュタイン選集」（全3巻）（共立出版）

96）湯川・井上共編「現代の科学Ⅱ」（中央公論社，「世界の名著」第60巻）

97) シュポルスキー他 佐々木 健他訳　「アインシュタインと現代物理学」　(東京図書)
98) ハイゼンベルク 田村松平訳　「自然科学的世界像」　(みすず書房)
99) ハイゼンベルク 冨山・河野共訳　「現代物理学の思想」　(みすず書房)
100) ハイゼンベルク 尾崎辰之助訳　「現代物理学の自然像」　(みすず書房)
101) ハイゼンベルク 山崎和夫訳　「部分と全体」　(みすず書房，近刊)
102) オッペンハイマー 矢島ほか共訳　「科学と人間社会」　(新評論社)
103) ハイトラー 岡・三木共訳　「科学と人間」　(みすず書房)
104) ボーム 村田良夫訳　「因果性と偶然性」　(東京図書)

94) はボーアの周辺にあった人々によるボーアの伝記的記述で，物理学上の仕事・思想に関するものも含まれている．たとえば相補性の概念については，ボーアによるいわゆるコペンハーゲン解釈の最も忠実な信奉者であるローゼンフェルトの解説がある．アインシュタインは量子力学に対し非正統的な態度をとっていた．彼の立場をやや一般的な形で述べたものに 96) に訳載されている「物理学と実在」がある．“量子力学による物理的実在の記述は完全か？”という表題をもつアインシュタインの論文は 95) の選集第一巻に訳載されている．この論文およびその他の機会でのアインシュタインとボーアの間の論争のボーア側からの解説は 96) に含まれている．なお 96) には有名な猫のたとえ話を含むシュレーディガーの観測の問題についての論文も含まれている．97) はソ連の学者の編修によるアインシュタインの仕事の解説の集録であるが，冒頭に他の著作に寄せたアインシュタインの自叙伝が訳載されている．ハイゼンベルクが最初に不確定性関係を導いた論文も 96) に含まれているが，彼の一般的な意味合いをもつ講演・論文を集録したものが 98)，99)，100) である．98) は最も若年の時期の所産で，99)，100)は後年期のものである．96) の原著の表題は“物理学と哲学”である．101) は最も新しく，量子力学から素統一の統一理論への思想の推理を回複した物理的対話篇である．102)，103) も一般講演に基づくもので，かつ原子力を中心として科学技術と人間性との間の緊張対立が問題にされた第二次大戦後の時期を反映しているものの，いづれも原子物理学についての解釈が試みられている．104) は以上の著者よりも若い世代による解説であるが，3) に関して触れたように正統的解釈に対してやや批判的な論調がみられる．

量子力学に基づく物質観ないしは世界観に関してはわが国の著書によるすぐれたもの

も少なくない.

105）湯 川 秀 樹　「自　選　集」（第1，2巻）　（朝日新聞社）
106）朝 永 振 一 郎　「量子力学的世界像」　（弘　文　堂）
107）坂 田 昌 一　「論集Ⅰ，物理学と方法」　（岩 波 書 店）
108）武 谷 三 男　「著　作　集」（第1，5巻）　（勁 草 書 房）
109）井 上 健 編　「科学の思想，Ⅰ」　（筑摩書房，現代日本思想大系）

105）の著者の量子力学に対する立場は選集第1巻に収められている“事実と法則”に最も明快に述べられている．ラプラスの魔物を象徴とする古典力学的世界像に対応する形で量子力学的世界像を描き出すことは，事実と法則の二重性や観測の問題を含む複雑な仕事である．106）にはディラック流の量子力学の数学形式を一応閉じたものとして量子力学的世界像が描かれている．107），108）にはマテリアリスティックな立場からの量子力学解釈に関する論考が収められている．この種の解釈を最初に打ち出したことは，認識の三段階論に基づく方法論の開拓とともに 107）の著者の功績であり，これらの開拓的な論文とその発展が108）に収められている．109）には湯川・坂田・武谷諸氏の論考の他に量子力学的H定理に基づく渡辺慧氏の時間論（「時間」（日白書院））が再録されている．

量子力学の幼年期すなわち量子の発見から前期量子論をへて合理的量子論としての量子力学が形成される歴史的過程は，主として成年期以後の量子力学を問題にする教科書・参考書の類では十分に顧りみられることがないのが普通である．（ただし 2）と 77）にはある程度含まれている．）この過程は，それ自身極めてエキサイティングな物語であるばかりでなく，量子力学から素粒子力学へ指向する現在の課題に関連して興味深いものである．この時期の記録としての原論文を参照する場合次のものは便利である．

110）物理学史研究刊行会編訳「物理学古典論文叢書」（全12巻）　（東海大学出版局）
111）天 野 清 訳 編　「熱輻射論と量子論の起源」　（大日本出版）
112）玉木・木村共編「中性子の発見と研究」　（大日本出版）

110）には1910年代までの重要な論文の反訳が各巻に分類され，各巻ごとに解説が付されている．各巻の分類題目は次の通りである；1．熱輻射と量子，2．光量子論，3．前期量子論，4．相対論，5．気体分子運動論，6．統計力学，7．放射能，8．電子，9．原子模型，10．原子構造論，11．金属電子編，12．磁性．なお，この10巻に収録されている1913年のボーアの原子構造に関する三部作は，その50周年を記念してまとめて再刊さ

れている．(N. Bohr, *On the Costitution of Atoms and Molecules*! Reprint, Munksguad, Copenhagen, 1953)．この Reprint 版にはローゼンフェルトのかなり詳しい序文が付けられている（この序文はローゼンフェルト「ボーア原子模型の成否」（雑誌「自然」昭43．4月～6月）として訳出されている.）111)，112) は戦前に刊行された叢書中の2編で，量子の発見・中性子の発見をつげる量子力学史上画期的なプランク，フェルミ，チャドウイック等の原論文を再録してこれに訳文，訳注ならびに周到な解説を付したもので，優れている．量子力学の発展過程を歴史的に考察したものに次のものがある．

113) 天野　清　「量子力学史」　（中央公論社，近刊）
114) 武谷三男　「量子力学の形成と論理」　（勁草書房）
115) 朝永振一郎編　「物理の歴史」　（毎日新聞社）
116) 辻　哲夫編　「現代物理学の形成」　（東海大学出版局）
117) ハンソン　村上陽一郎訳　「科学理論はいかに生れたか」　（講談社）

113) は著者の戦争空襲による死によって残された未定稿を編集して以前に刊行されたものの再刊である．やや思想史的傾向が強い．量子力学の歴史的な形成過程を論理的に分析することは，ニュートン力学の形成についての同種の分析や量子力学の数学形式の立体的な論理構造の解明とともに，認識発展の論理ないしは方法論の問題として重要である．114) は，原子模型の成立までの過程に対してこの種発展の論理の立場からの分析を行なった労作である．113) と同様旧刊の複刊である．115) 中の「量子論」の項ではやや 113) に近い立場から鋭利な分析がなされている．116) には原典に忠実な歴史的論考が集められている．117) の原著は「発明のパターン」という表題をもつ．現代物理学の諸発見の論理に対して既成の哲学体系がマッチしないという意識から論じられているが，一種の類型論の段階に止まっている．数式を余り用いず一種のエキサイティングでスリリングな物語として種々のエピソードを交えて原子物理学の発展を述べたものとしては次のものがある．

118) ガモフ　中村誠太郎訳　「現代の物理学」　（河出書房新社）
119) ホフマン　藤本陽一訳　「量子論物語」　（河出書房新社）
120) パイエルス　井上健訳　「物理の世界」　（岩波書店）
121) アインシュタイン・シュレーディンガー他　谷川・中村編・監訳　「相対性理論と量子力学の誕生」　（講談社，現代物理の世界-I）

121）は雑誌「サイエンティフィック・アメリカン」に載った啓蒙的論文を集めたものである．

ディラックがその教科書5）でなしとげているように，量子力学の一般理論形式を一応古典理論と無縁な形で展開することが可能である．しかしこのことは量子力学が古典力学の機械的否定・絶縁の上に成り立つことを示すものではない．むしろ，歴史的形成過程を分析した上述の労作が示すように，またボーアのいう「対応論的立場」からの考察の有効性が物語るように，できあがった量子力学の体系を理解する上でも，古典物理学からの適切な接近法が有効であることを予想させる．同時にこのことは古典物理学のもつ伝統的な構造を量子力学の照明のもとで新しく見直すことを可能にする．このような立場から古典的な粒子像や古典的な場の描像を再構成する試みが最近少なくない．この種の性格の著作は量子力学への前階梯として教育的にも適切であろう．前に挙げた個人あるいはグループによる理論物理学の講義録ないしは教程の各巻は，当然この種の性格のものとして推奨しうる．ここでは直接量子力学に関係ある分野として，解析力学・電気力学・相対性理論の分野でのこの種の単行書をいくつか挙げておく．

古典力学ないしは解析力学に関しては

122）富山小太郎　「力　学」　（岩波書店）
123）伏見康治　「現代物理学を学ぶための古典力学」　（岩波書店）
124）山内恭彦　「一般力学」　（岩波書店）
125）スレーター・フランク　柿内賢信訳　「力　学」　（丸善）
126）ゴールドスタイン　野間・瀬川共訳　「古典力学」　（吉岡書店）

126）は素材の選択や配列の適切さと，歴史的な原典への参照が随所に行なわれている点でよくできている．ゾンマーフェルトの教程85）の諸巻も歴史的な参照がかなり配慮されていて便利であるが，古典力学の歴史的批判的記述としては，アインシュタインに相対論への刺激を与えられたものとして有名なマッハの次の著作は量子力学には直接影響するものではないにしても逸することはできない．

127）マッハ　伏見譲訳　「力　学」　（講談社）

ランダウの教程86）中の「力学」の巻は変分原理の形式で一貫され，場の理論形式への前階梯として自然な構成をもつ点に特色がある．ただし場の古典論そのものは内容的には振動系や連続体の力学に近親性がある．連続体や弾性体の力学としてはゾンマーフ

ェルトやランダウの教科書がすぐれているが，わが国のも としては比較的新しい次のものがある．

128) 戸田盛和「振動論」（培風館）

129) 今井 功「流体力学」（岩波書店，岩波全書）

古典電気力学（光学）または電磁場論としては

130) 宮島竜興「電磁気学」（みすず書房）

131) 高橋秀俊「電磁気学」（裳華房）

132) 平川治正「電磁気学」（培風館）

133) 砂川重信「理論電磁気学」（紀伊国屋書店）

134) オッペンハイマー 小林 稔 訳「電気力学」（吉岡書店）

135) パノフスキー・フイリップス 林ほか共訳「電磁気学（新版）」，（上・下）（吉岡書店）

136) ロッシ 中井ほか共訳「光 学」（上・下）（吉岡書店）

134）は講義のノートに基づくもので相対論および量子論の立場から，いはば半古典論的な電気力学の極めて簡潔な説明になっている．135），136）はこの種の分野の教科書としてかなり詳しく親切である．ド・ブロイの物質派の発想の一つの源である光学一力学アナロジーについては，ゾンマーフェルトやランダウ，ファイマンの教程にすぐれた解説があるが，次のものにはある議論は最も周到である．

137) ボルン・ヴォルフ (Born, Wolf) "*Principles of Optics*" (Pergamon Press)

相対性理論（特殊および一般）については次のものがある．

138) ボルン 林 一 訳「アインシュタインの相対性理論」（東京図書）

139) ベルグマン 田村・細江 共訳「相対性理論序説」（三一書房）

140) メラー 永田・伊藤 共訳「相対性理論」（みすず書房）

141) アインシュタイン 矢野健太郎 訳「相対論の意味」（岩波書店）

142) 山内・内山・中野共著「一般相対性および重力の理論（増補版）」（裳華房）

138）は相対性原理に関する初等的な解説で，原著の刊行は古いが，明快な説明で一読の価値がある．139），140）は手堅い教科書であるが，前者はやや数学的であるのに対して後者の議論は物理的である．141）はアインシュタイン自身による統一場の理論を含む相対性理論の解説である．相対性理論についてのアインシュタインの原論文は 95）の選集に収録されている．142）には重力場の量子化についての解説も含まれている．

86）のランダウの教程には“場の古典論”として特殊相対性理論（古典電磁場）と一般相対性理論（重力理論）とが手頃なスペースの中に極めてみごとに解説されている．ただし，現在でも相対性理論に関しては最もすぐれているとボルンの評したパウリの著書を付け加えておく．

143）パウリ (W. Pauli)　“*Theory of Relativity*”　(Pergamon Press)

初版のドイツ版 *Relativitätstheorie* (1921) は Pauli の *Collected Papers* (V. Weisskopf 編, Interscience Pub. 1964) の第1巻に英訳に際しての Supplementary Notes (1948) とともに収められている．138）はドイツ版の部分の英訳に Supplementary Notes を付け加えたものである．

量子力学に関係して用いられる数学的道具についての参考書といっても，数学的な基礎付けから特殊な問題への応用までを含めれば，広汎なものになるが，シッフの本書程度を標準にして古典解析の応用を中心にした通論的なものに次のようなものがある．

144）寺沢寛一編　「自然科学者のための数学概論」（正編・応用編）　（岩波書店）

145）河田龍夫　「応用数学概論」Ⅰ・Ⅱ　（岩波書店，岩波全書）

146）ホイテッカー・ワトソン 佐藤・州之内 共訳　「モダン・アナリシス」　（宇野書店）

147）カルマン・ビオ 村上ほか共訳　「工学における数学的方法」　（法政大学出版局）

148）クーラン・ヒルベルト 斉藤利弥 監訳　「数理物理学の方法」（全4巻）　（東京図書）

149）モース・フェシュバッハ (Morse-Feshbach)　“*Methods of Theoretical Physics*” (I・II)　(McGraw-Hill)

144)，147)，149）は物理数学的な性格が強い．144）の応用篇には波動方程式の近似解法についての議論がある．145）は簡潔ながら便利である．146)，148）はしばしば引用される定評のある名著．149）は千頁を超える大著であるが，種々の点で利用しやすい．次の講座・教程の中の項目には利用しやすいものが多い．

150）「岩波講座現代応用数学」（全15巻）　（岩波書店）

151）スミルノフ　「高等数学教程」（全12巻）　（共立出版）

代数学に関しては

152）彌永・杉浦共著　「応用数学者のための代数学」　（岩波書店）

153）ファン・デル・ヴェルデン 銀林浩 訳　「現代代数学」（全3巻）　（東京図書）

154）バーコフ・マクレーン 奥川・辻 共訳　「現代代数学概論」（改訂3版）　（白水社）

などがあるが，量子力学における群論的方法に関しては次のものが簡便である．

155) 山内恭彦 「回転群とその表現」 （岩波書店）
156) 山内・杉浦共著 「連続群論入門」 （培風館）

本書のレベルの理論形式には必ずしも必要ではないが場の量子論を含む量子力学の数学的基礎に興味のある読者のために，「超関数」の本格的議論やそれを基礎とするモダーンな線型解析学の理論と応用についての解説書をあげておく．

157) 加藤敏夫 「位相解析」 （共立出版）
158) シュワルツ 岩村ほか共訳 「超函数の理論」（原書第3版） （岩波書店）
159) シュワルツ 吉田・渡辺共訳 「物理数学の方法」 （岩波書店）
160) ゲルファント 功力金二郎ほか訳 「超関数論入門」Ⅰ・Ⅱ （共立出版）

最後に量子力学の演習問題を解説したものをあげておこう．

161) 三枝・瀬藤 「量子力学演習」（上・下） （吉岡書店）
162) 小谷・梅沢共編 「大学演習 量子力学」 （裳華房）
163) 高木修二他編 「演習量子力学・原子核」 （共立出版）
164) 金沢・小出 「量子力学演習」 （朝倉書店）

161）はシッフの本書の問題の解答を集めたものである．

付録：基本的な物理量の数値

$\hbar=1.054\times10^{-27}$erg-sec ……………… （プランク定数の $1/2\pi$ 倍）

$e=4.80\times10^{-10}$esu ……………………………… （電子荷電の大きさ）

$m=0.911\times10^{-27}$g ………………………………………… （電子質量）

$M=1.672\times10^{-24}$g………………………………………… （陽子質量）

$a_0=\hbar^2/me^2=5.29\times10^{-9}$cm ……………………………… （ボーア半径）

$e^2/a_0=27.2$ev ………………… （水素原子の結合エネルギーの2倍）

$c=3.00\times10^{10}$cm/sec……………………………………………… （光速度）

$\hbar c/e^2=137$ ……………………………………… （微細構造定数の逆数）

$e\hbar/2mc=0.927\times10^{-20}$erg/oersted ………………… （ボーア磁子）

$mc^2=5.11\times10^5$ev ………………………… （電子の静止エネルギー）

$Mc^2=938$ Mev ……………………………… （陽子の静止エネルギー）

1 ev$=1.602\times10^{-12}$erg ……………………… （1電子ボルトの定義）

（運動量 1 ev/c に対応する波長）$=12,400$ Å

（エネルギー 1 ev に対応する絶対温度）$=11,600^\circ$K

ISBN4-8427-0000-9

新版 量子力学（下）

1972年8月15日　第1刷発行
2006年1月20日　第23刷発行

訳　者　井上　健
発行者　吉岡　誠

京都市左京区田中門前町87
発行所　株式会社　吉岡書店
電話(075)781－4747／振替京都01030-8-4624

組版／同朋舎・印刷／一進印刷・製本／藤沢製本

ISBN4-4827-0158-7

「物理学叢書」刊行に際して

二十世紀の物理学の進歩は，物質の極微の構造の暴露に，物質の精妙な機構の解明に，驚異的な発展，飛躍をもたらした．その結果，新しい自然力の解放，支配を実現化したばかりでなく，新しい物質の創造，生命の謎への挑戦をも企画せしめつつある．更に，既知の自然力の未曾有の強力な駆使さえ可能にしつつある．二十世紀後半に至って，原子力に，あるいはオートメーションに今や第二の産業革命を喚起せんとするに至った原動力は，物理学の開拓的な創造性によることは言をまたない．更に，現在の物理学は，かつての相対論，量子論の出現にも比すべき革命の前夜にあるといわれているこの時に当たり，物理学の新領域の単なる解説，あるいは時局的な技術書ではなく，真にわが国物理学の発展の糧となるべき良書の出版は緊急の必要事といわねばならぬ．ここに「物理学叢書」を編んで世に送る所以である．

この叢書に収められる原著は，いずれもそれぞれの分野の世界的権威者による定評ある名著に限られるが，前述の精神に鑑みその性格，スタイルに特徴あるものを選ぶと共に，その本質において創造的価値高きものを目標とした．

この叢書が，物理学またはその関連分野へ進む学徒に，よき伴侶として用いられ，真にその血肉となり得ることがわれわれの念願であり，更にこの叢書によって伝えられる海外の学風が，広くわが国の教育，研究へのよき刺戟となり，わが国の明日の科学を築く基礎に貢献するところがあれば幸いである．

(1954年12月)

物理学叢書

シッフ　井上　健訳 新版 量子力学 上・下 上 368頁　下 320頁	刊行以来無比の標準的教科書として絶賛を博してきた本書は，原著第3版刊行にともない全面的に版を改めた．基本的な概念やその数学的形式を丁寧に解説されている量子力学の入門書である．
ライフ　中山寿夫・小林祐次訳 統計熱物理学の基礎 上・中・下 上 388頁　中 352頁　下 229頁	統計力学の基礎概念から応用まで体系的に取扱い，初心者が容易に理解できるよう豊富な例題を駆使して懇切丁寧に解説した学部学生向き教科書の決定版．化学・生物の学生にも理解し易い記述である．
ハーケン　松原武生・村尾　剛訳 固体の場の量子論 上・下 —素励起物理学入門—　上・下 232頁	教養程度の知識のみで，短期間に系統的に場の量子論の方法と固体論への応用を完全に習得できる．上巻では多くの演習問題で理解を早め，下巻では現在の考え方・モデル・方法などが整然と解説されている．
アシュクロフト，マーミン　松原武生・町田一成訳 固体物理の基礎 (全4巻)　上・I 304頁　下・I 288頁 上・II 272頁　下・II 255頁	学部生にも大学院生にも使えるよう工夫され，内容の取捨選択がしやすく，種々の目的，異なる水準でもうまく使い分けられる．固体物理学の現象の記述と理論的解析による統一という著者の目標は完全に達成されている．
シュッツ　家・二間瀬・観山訳 物理学における幾何学的方法 328頁	本書は近年理論物理学において，極めて基礎的でかつ有効な数学的手法である微分幾何についての教科書である概念を中心に分かり易く解説してあり，物理学への応用も示してある．
J. J. Sakurai　桜井明夫訳 現代の量子力学 上・下 上 392頁　下 320頁	素粒子物理学の独創的理論家であった著者が，UCLAでの多年の講義に基づき書き遺した現代的教科書．非相対論的量子力学の核心が，最近の理論・実験の発展に則し，新しい視点から明快かつ具体的に記述されている．

頁数記載なきは品切もしくは未刊

ワインバーグ　青山秀明・有末宏明訳 **粒子と量子場** 場の量子論シリーズ①　432頁	簡単な歴史的記述から入り，相対性原理と量子力学の理論を用いて素粒子の性質を論じることにより「場の量子論」が自然の帰結として現れてくる．貴重な参考文献であると同時に，教科書として適切である．
ワインバーグ　青山秀明・有末宏明訳 **量子場の理論形式** 場の量子論シリーズ②　446頁	本書はS. Weinbergによる「場の量子論」全6巻の第2巻である．正準形式，ファイマン則，量子電磁理論，経路積分，くりこみ，などの理論形式の核となる部分が論じられる．
ワインバーグ　青山秀明・有末宏明訳 **非可換ゲージ理論** 場の量子論シリーズ③　376頁	現代の素粒子論における標準理論の基礎をなす非可換ゲージ理論が導入され，また場の理論の現代的手法である有効場の理論，くりこみ群，大域的対称性の自発的破れの一般論が展開される．
ワインバーグ　青山秀明・有末宏明訳 **場の量子論の現代的諸相** 場の量子論シリーズ④　342頁	くりこみ群や対称性の破れにとって重要な演算子積展開，電弱理論のゲージ対称性の自発的破れが論じられる．これとは対称的に量子力効果として対称性を破るアノマリーと，それによる物理的結論が述べられる．
ワインバーグ　青山・有末・杉山訳 **超対称性：構成と超対称標準模型** 場の量子論シリーズ⑤　380頁	最初に超対称性の歴史について述べ，超対称性代数を構成する．その後，超対称性を持つ場の理論，ゲージ理論を構成し，それらに基づき，標準模型を超対称性を持つように拡張した模型を調べる．
ワインバーグ　青山・有末・杉山訳 **超対称性：非摂動論的効果と拡張** 場の量子論シリーズ⑥　268頁	本書では，超対称性の非摂動論的局面と，超対称性の超重力への拡張，高次元での一般論等を述べ，Pブレーンに関係した最近の話題にも触れ，本シリーズの締めくくりにふさわしい意欲的な内容となっている．
Y. イムリー　樺沢宇紀訳 **メソスコピック物理入門** 314頁	固体電子の局在と緩和の一般論，典型的な題材である微細な系の永久電流と量子輸送，量子ホール効果，超伝導メソスコピック系，および雑音の問題を著者一流の観点から論じる．
S. A. サフラン　好村滋行訳 **コロイドの物理学** —表面・界面・膜面の熱統計力学—　368頁	熱統計力学の立場から新たに捉え直した世界的にユニークな書である．界面張力，ラフニング転移，ぬれ，界面間の相互作用，膜弾性，自己会合などの問題を扱う，学部3・4年から大学院生以上の学生などを対象とする．
スタウファー，アハロニー　小田垣孝訳 **パーコレーションの基本原理** (原書第2版・修訂版)　332頁	初版以来多くの発見およびより精密な数値データが加えられ，さらに新たに導入された概念が含められている．また演習が付け加えられ，教科書としてさらに使いやすくなっている．
デュラン　中西　秀・奥村　剛訳 **粉粒体の物理学** —砂と粉と粒子の世界への誘い—　310頁	初等的な力学から解き起こし，最近の研究の成果までを初学者にもわかるようにまとめている．物理学の立場から書かれた粉粒体の教科書としては，(驚くべきことに)本書はほとんど唯一のものであろう．
ジャクソン　西田　稔訳 **電磁気学** (原書第3版)　上 614頁　下 576頁	この原書第3版では，電磁気学の基礎として，わかりやすく洗練された内容と，新たな増補，そして最近の重要な応用問題の追加がなされている．定評のあった第2版にも増して，標準的教科書としての価値を高めている．

シック　岩渕修一訳
量　子　井　戸
(原書補訂版)　152頁

多数の訳注に加え，原書を理解するうえで必要な量子力学，統計物理学，固体電子論の基礎事項や原書の補足説明を補遺として加えられ，原書の$\frac{1}{2}$に達している．

アイシャム　佐藤文隆・森川雅博訳
量　子　論
―その数学および構造の基礎―　278頁

一通り標準的な量子力学を学んだ読者を対象に，量子論の基礎体系を整理し理解を深めさす．量子論の基礎体系と関わってくるハイテクの量子力学や，宇宙の量子論などを考えるとき，本書は非常に有効である．

ドゥジェンヌ他　奥村　剛訳
表面張力の物理学
―しずく，あわ，みずたま，さざなみの世界―　312頁

長年にわたり，毛管現象や濡れ現象に取り組んできた著者らが著した生き生きとした書．ごく基本的なことからスタートし，最新の実験や工業での現況を例に，基本原理のみならず最先端の豊富な話題についても解説する．

ティンカム　青木亮三・門脇和男訳
超　伝　導　入　門　上下
(原書第2版)　上 368頁　下 近刊

超伝導のBCS理論以前に既にそのエネルギーギャップの存在を実証したM. Tinkhamが初版を画期的に改訂増補した．ユニークな内容であり，超伝導の新分野に関心のある学生,研究者,技術者にとっては待望の書である．

グロッソ，パラビチニ　安食博志訳
固　体　物　理　学　上中下
上 320頁　中 336頁　下 334頁

著者らの教育的な観点から，固体物理学の重要な概念や考え方が理論的，かつ明瞭に説明されている新しいタイプの教科書．また，実験による測定値やグラフもバランスよく載せられている．参考文献も豊富に紹介する．

タウンゼント他　雨倉　宏訳(著)
イオン注入の光学的効果
―基礎光物性から光導波路・ナノ粒子まで―　376頁

原著出版後の発展について補うため一章を加えた増補版．対象は主に絶縁体やガラスへのイオン注入効果であり，その応用として光導波路形式，ナノ粒子形式について紹介する．イオン注入に関心のある人には待望の書．

ペシィック，スミス　町田一成訳
ボーズ・アインシュタイン凝縮
424頁

この分野の基礎知識をコンパクトにまとめた書．統計力学を学んだ学部生から大学院生，またこの分野に関心のある専門家には役立つであろう．理論のみならず，実験の基礎原理が量子統計物理学の立場から解説されている．

別　巻

井上　健監修・三枝寿勝・瀬藤憲昭著
量　子　力　学　演　習
―シッフの問題解説―　392頁

理論的基礎に重点をおきながら，実験・技術を志ざす学生にも容易に理解できる演習書たるべく，代表的教科書として定評あるシッフの同書より，章末の各問題を詳細に解説した．

大槻義彦監修・飯高敏晃他著
演習現代の量子力学
―J. J. サクライの問題解説―　336頁

本書は，J. J. サクライの教科書「現代の量子力学」の章末問題の解説である．この解説は1991年度，早稲田大学の物理学科，応用物理学科のはじめて量子力学を学ぶ学部3年生を対象に行った演習に基づいている．

F. クローズ　井上　健訳・九後汰一郎補遺
訂正増補 **宇宙という名の玉ねぎ**
―クォーク達と宇宙の素性―　268頁

物質の根源の姿を追求してきた今世紀の素粒子物理学の，心躍る発見と認識の深化のプロセスを読者に追体験させてくれる．数式を用いずに一般向けに解説．前著に「その後の発展と歴史的経緯に対する補遺」追加．